

複素周波数領域有限差分法の開発と  
プラズモニクデバイス設計に関する研究

令和3年1月

日本大学大学院理工学研究科博士後期課程

電気工学専攻

呉 迪

# 目次

<b>第 1 章 序論</b> .....	<b>2</b>
1.1 研究の背景 .....	2
1.2 研究の目的 .....	2
1.3 本論文で用いる記号と用語.....	4
<b>第 2 章 複素周波数領域有限差分法の開発</b> .....	<b>7</b>
2.1 Maxwell 方程式の有限差分近似 .....	7
2.2 波動方程式の有限差分近似.....	9
2.3 吸収境界条件の実装.....	11
2.4 分散性モデルの実装.....	13
2.5 高速逆 Laplace 変換を併用した時間応答解析 .....	16
2.6 数値解析の信頼性 .....	18
<b>第 3 章 時間応答解析の高速化及び並列計算</b> .....	<b>24</b>
3.1 マルチレベルの解析領域分割 .....	24
3.2 高速逆 Laplace 変換法の最適化 .....	27
3.3 並列計算及び負荷分散 .....	29
<b>第 4 章 プラズモニックデバイス設計への応用</b> .....	<b>34</b>
4.1 光直接磁気記録用アパーチャーアンテナ .....	34
4.2 グレーティング型カプラーを用いたプラズモニック導波路.....	37
4.3 量子ウォーク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 .....	41
<b>第 5 章 結言</b> .....	<b>47</b>
<b>謝辞</b> .....	<b>49</b>
<b>参考文献</b> .....	<b>50</b>

# 第 1 章 序論

## 1.1 研究の背景

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[1, 2]．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[3]．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[4-12]．時間領域有限差分法(Finite-Difference Time-Domain: FDTD) [13-16] は商用シミュレータにも搭載され，電磁界時間応答解析の代表的な手法として，近年最も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安定条件[14]が存在するため，図 1.1 に示す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 FILT[17-19] 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，新規手法の開発が極めて重要である．

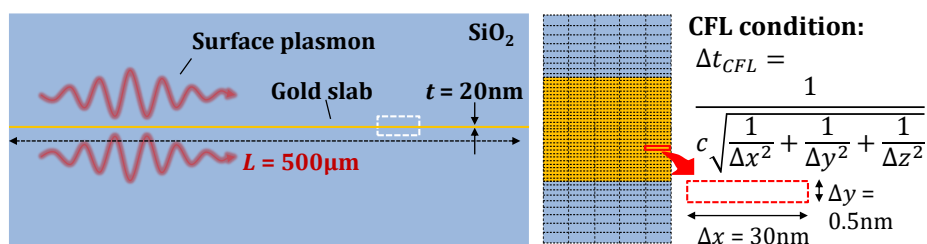


図 1.1 ナノ金属板を用いたプラズモニック導波路と時間応答解析における安定条件

## 1.2 研究の目的

周波数領域差分法 (Finite-Difference Frequency-Domain: FDFD)は薄膜構造[20]や導波路[21]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[13]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

が可能ななどの利点がある[8]. 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[22, 23], 定式化の改良による異方性[24]や非線形媒質[25]の解析も比較的容易に実現できる.

本研究では, FDFD 法を複素周波数領域 (Complex-Frequency-Domain: CFD)に拡張し, 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 変換法(Fast Inverse Laplace Transform: FILT)[26]と併用し, 電磁界の時間応答を求める FDCFD-FILT を開発した[4-7]. FDCFD-FILT は電磁界の定常応答と過渡応答のいずれも効率よく解析することが可能である. 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や並列計算に適している利点がある. 時間応答解析を行う際は図 1.2 に示すように FDCFD で求めた複素周波数領域の数値結果を FILT で時間領域に変換する.

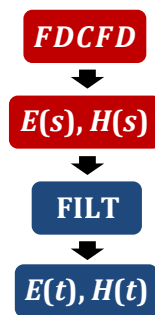


図 1.2 FDCFD-FILT による時間応答解析

本論文では, プラズモニックデバイスの設計に用いる FDCFD-FILT の開発とその実証を目的とし, 以下の検討を行った.

第 2 章では, FDCFD-FILT の理論と定式化について述べた上, 本手法を電磁波散乱問題に適用し, 従来手法と比較することによって計算精度を調査した. 本章では, 実際の問題を解くために必要とされる吸収境界条件の扱いを議論し, FDCFD における実装方法を示した. また, 媒質の周波数分散性とナノスケールにおける電子分布の非局所効果について検討し, 電磁波散乱解析での有効性を明らかにした.

第 3 章では, 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 に使用するマルチレベル領域分割法と FILT を適用する際の計算負荷分散法を議論した. ここで, マルチレベル領域分割法と Schur 補行列を用いることによって, FDCFD における線形方程式を直接法で求解する手法を実現した. また, FILT のアルゴリズムを高速化するために, 複素平面で処理する特異点を最適化した上で, 複数の計算ノードに負荷を分散することにより, 並列計算を実現した.

第 4 章では FDCFD-FILT を用いた電磁デバイスの設計及びその検証例として, 以下の 3 つの設計例を示した.

#### (A) 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提案されている[27, 28]. 本研究ではアンテナ近傍の電磁界分布を計算し, 局所的な円偏光生成を確認した.

(B) 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えるデバイスとして提案されている[29]. 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.

(C) 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[30-32]. 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, 量子ウォークへの実用性を明らかにした.

第 5 章では, 本研究で得られた成果と各章の内容をまとめた上, 複素周波数領域有限差分法に残された課題と問題点について述べた.

### 1.3 本論文で用いる記号と用語

本論文で用いる記号と用語は次の通りである.

記号	説明
$E$	電界
$H$	磁界
$D$	電束密度
$B$	磁束密度
$\nabla$	ナブラ演算子
$\rho$	電荷密度
$J$	電流密度
$t$	時間
$\epsilon$	媒質の誘電率
$\epsilon_0$	真空の誘電率
$\epsilon_r$	媒質の比誘電率
$\mu$	媒質の透磁率
$\mu_0$	真空の透磁率
$\mu_r$	媒質の比透磁率
$\sigma$	媒質の導電率
$f(u)$	任意関数
$\Delta u$	微小変化量

$r^{i,j,k}$	Yee セルの頂点座標
$j$	虚数単位
$\omega$	角周波数
$s$	複素周波数
$\nabla^e$	電界 $E$ に関するナブラ演算子
$\nabla^h$	磁界 $H$ に関するナブラ演算子
$D_x$	$x$ 方向の微分作用素
$D_y$	$y$ 方向の微分作用素
$D_z$	$z$ 方向の微分作用素
$\Delta x$	$x$ 方向の微小変化量
$\Delta y$	$y$ 方向の微小変化量
$\Delta z$	$z$ 方向の微小変化量
$e_w$	電界の未知ベクトル
$h_w$	磁界の未知ベクトル
$J_w$	電流の既知ベクトル
$M$	PML の減衰率係数
$L$	PML の最大層数
$\nabla_c^e$	PML の媒質係数を含むナブラ演算子(電界)
$\nabla_c^h$	PML の媒質係数を含むナブラ演算子(磁界)
$c_w^{i,j,k}$	頂点 $r^{i,j,k}$ のセルにおける PML の媒質係数
$\eta$	媒質の波動インピーダンス
$m_e$	電子の有効質量
$u$	束縛電子の位置
$\Gamma_0$	電子衝突の減衰定数
$\omega_0$	束縛の固有振動角周波数
$n_e$	電荷密度
$e$	電子の電荷
$\varepsilon_\infty$	周波数無限大における媒質の比誘電率
$P$	電気分極
$v$	電子の流速
$p$	電子が受ける圧力
$\hbar$	プランク定数
$n_{e0}$	熱平衡状態における電子密度
$E_{ec}$	自然対数の近似値
$f_{ec}(t, \alpha)$	時間領域の近似関数
$F(s)$	複素周波数領域における $F(t)$ の像関数

---

$\alpha$	FILT の誤差パラメータ
$k$	FILT における無限級数の打ち切り項数
$p$	Euler 変換の項数(虚軸のプラス方向)
$M_g$	疑似 Gaussian 関数にける無限級数打ち切り項数
$C(M, i)$	疑似 Gaussian 関数における二項係数
$\omega_m$	疑似変調 Gaussian パルス変調周波数
$t_w$	疑似変調 Gaussian パルスのパルス幅
$\lambda$	入射波の波長
$A_0$	FDCFD における線形方程式の係数行列
$x_0$	FDCFD における線形方程式の未知ベクトル
$b_0$	FDCFD における線形方程式の既知ベクトル
$D_i$	サブ領域 <i>i</i> に対応する係数行列
$S_{i,j}$	分割面に対応する係数行列
$U_i$	サブ領域と分割面の連結に対応する係数行列(上三角)
$L_i$	サブ領域と分割面の連結に対応する係数行列(下三角)
$k_1$	無限級数の打ち切り項数(プラス方向)
$k_2$	無限級数の打ち切り項数(マイナス方向)
$k_c$	入射波の中心周波数に対応する項
$f_c$	入射波の中心周波数
$N_s$	複素周波数領域の分割数
$N_t$	時間領域の分割数
$L_a$	アパーチャー型アンテナの辺の長さ
$w$	アパーチャー型アンテナの厚み
$a$	アパーチャー型アンテナ開口の幅
$I$	電界強度
$C$	円偏光度
$F$	円偏光生成の性能指数
$\lambda_g$	誘電体グレーティング構造の周期
$W_a$	グレーティングの空気層幅
$t_{Au}$	金属薄膜の厚み
$R$	グレーティングの反射率
$C_g$	グレーティングの入射光との結合率

---

## 第 2 章

### 複素周波数領域有限差分法の開発

近年、アンテナやテラヘルツ・光・プラズモニックデバイス等の設計において数値解析が不可欠となり、計算電磁気学の分野において様々な解析手法が提案されている[4-12]. 周波数領域有限差分法(Finite-Difference Frequency-Domain: FDFD)は薄膜構造や導波路などの解析において有力な手法として知られている[21, 22]. 本章では、FDFD 法の複素周波数領域における拡張である複素周波数領域有限差分法(Finite-Difference Complex-Frequency-Domain: FDCFD)の定式化について述べる.

#### 2.1 Maxwell 方程式の有限差分近似

Maxwell 方程式は電磁界の振舞いを記述する古典電磁気学の支配方程式である. 本研究では以下の微分形式の Maxwell 方程式より、媒質における電界及び磁界を求める.

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (2.1-a)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J}, \quad (2.1-b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (2.1-c)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.1-d)$$

ここで  $\mathbf{E}$  [V/m] は電界,  $\mathbf{H}$  [A/m] は磁界,  $\mathbf{D}$  [C/m<sup>2</sup>] は電束密度,  $\mathbf{B}$  [T] は磁束密度,  $\rho$  [C/m<sup>3</sup>] は電荷密度,  $\mathbf{J}$  [A/m<sup>2</sup>] は電流密度である. 本研究では以下に示す媒質の構成方程式を用いる.

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \quad (2.2-a)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad (2.2-b)$$

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}, \quad (2.2-c)$$

ここで、誘電率は  $\varepsilon$  [F/m], 透磁率は  $\mu$  [H/m], 導電率は  $\sigma$  [S/m] である. また,  $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$  であり,  $\varepsilon_0$  と  $\varepsilon_r$  はそれぞれ真空の誘電率と媒質の比誘電率を示す. また,  $\mu = \mu_0 \mu_r$  であり,  $\mu_0$  と  $\mu_r$  は真空の透磁率と媒質の比透磁率である.

次に、差分法を用いて、Maxwell 方程式を離散化する. 差分法は微分方程式を有限差分近似で離散化し、求解する数値手法である. 本研究では、解析領域を微小セルに分割することで、Maxwell 方程式を空間について差分近似を行い、離散化する. また、本研究では次式に示す二次精度の中心差分を用いた.

$$\frac{\partial f(u)}{\partial u} \approx \frac{f(u + 0.5\Delta u) - f(u - 0.5\Delta u)}{\Delta u}. \quad (2.3)$$

ここで、 $f(u)$  は変数が  $u$  の任意の関数であり、 $\Delta u$  は  $u$  の微小変化量を表す.

Yee セル[13]は電磁界のふるまいを差分法で計算するために提案された直交格子の一種で



あり、電界と磁界が交互に配置されることが特徴的である。図 2.1 に三次元解析領域を Yee セルで分割する例を示す。図のように Yee セルでは電界と磁界が半セルずれている。ここで、 $E_x, E_y, E_z$  と  $H_x, H_y, H_z$  は直交座標系における各方向成分の電界と磁界であり、 $r^{i,j,k}$  はセルの頂点を表す。Yee セルを用いることで、連続空間を離散空間にすることができる。

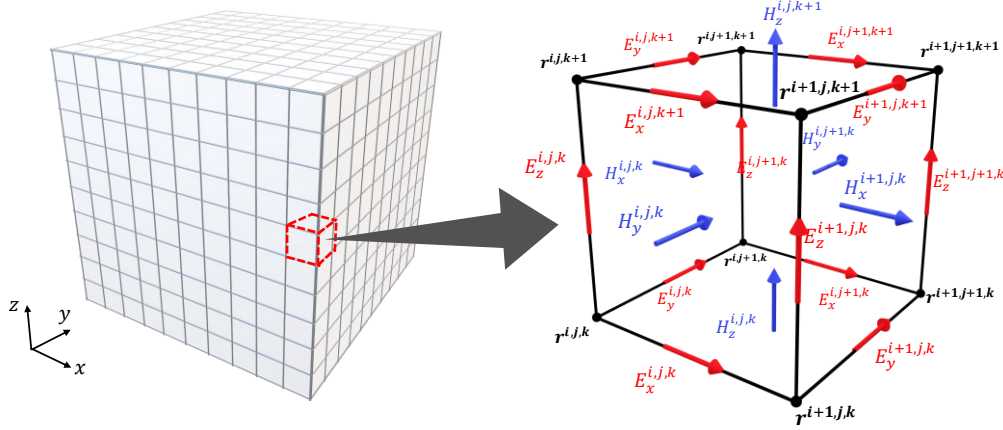


図 2.1 Yee セルによる解析領域の分割と電磁界の空間配置

これまでに報告されていた FDFD 法では、電磁界の時間因子を  $e^{j\omega t}$  と仮定し、式(2.1)に示す Maxwell 方程式の時間微分を  $j\omega$  に置き換える。本手法では、周波数領域差分法を複素周波数  $s$  で定式化し、FDFD 法を複素周波数領域有限差分法 (Finite-Difference Complex-Frequency-Domain: FDCFD) に拡張する。電磁界の時間因子を  $e^{st}$  と仮定すると、式(2.1 - a)及び式(2.1 - b)は以下のような線形方程式に変形できる。

$$\begin{bmatrix} s\mu & \nabla^e \times \\ \nabla^h \times & -s\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{E} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \mathbf{J} \end{bmatrix}, \quad (2.4)$$

ここで、 $s (:= \delta + j\omega)$  は複素周波数である。式(2.3)に示す二次精度の中心差分を全解析領域に適用すると、次式が得られる。

$$\begin{bmatrix} s\mu_x & & & & -D_z^e & D_y^e \\ & s\mu_y & & & & -D_x^e \\ & & s\mu_z & & & D_x^e \\ & -D_z^h & D_y^h & -s\varepsilon_x & & \\ D_z^h & & -D_x^h & & -s\varepsilon_y & \\ -D_y^h & D_x^h & & & & -s\varepsilon_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_x \\ h_y \\ h_z \\ e_x \\ e_y \\ e_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ J_x \\ J_y \\ J_z \end{bmatrix}, \quad (2.5)$$

この連立方程式の求解を直接法または反復法[33]により行うことで、複素周波数領域における電磁界未知ベクトルを求める。ここで、解析領域全体は  $N_x \times N_y \times N_z$  個の Yee セルに分割されており、セルのサイズは  $\Delta x \times \Delta y \times \Delta z$  で表せる。また、 $J_w$  と  $\varepsilon_w$  は電界  $E_w$  と同じ位置であり、 $\mu_w$  は  $H_w$  と同じ位置にある。

$$e_w = \begin{bmatrix} E_w^{1,1,1} \\ E_w^{2,1,1} \\ \vdots \\ E_w^{N_x,1,1} \\ E_w^{N_x,2,1} \\ \vdots \\ E_w^{N_x,N_y,N_z} \end{bmatrix}, h_w = \begin{bmatrix} H_w^{1,1,1} \\ H_w^{2,1,1} \\ \vdots \\ H_w^{N_x,1,1} \\ H_w^{N_x,2,1} \\ \vdots \\ H_w^{N_x,N_y,N_z} \end{bmatrix}, J_w = \begin{bmatrix} J_w^{1,1,1} \\ J_w^{2,1,1} \\ \vdots \\ J_w^{N_x,1,1} \\ J_w^{N_x,2,1} \\ \vdots \\ J_w^{N_x,N_y,N_z} \end{bmatrix}, \mu_w = \text{diag} \begin{bmatrix} \mu_w^{1,1,1} \\ \mu_w^{2,1,1} \\ \vdots \\ \mu_w^{N_x,1,1} \\ \mu_w^{N_x,2,1} \\ \vdots \\ \mu_w^{N_x,N_y,N_z} \end{bmatrix}, \varepsilon_w = \text{diag} \begin{bmatrix} \varepsilon_w^{1,1,1} \\ \varepsilon_w^{2,1,1} \\ \vdots \\ \varepsilon_w^{N_x,1,1} \\ \varepsilon_w^{N_x,2,1} \\ \vdots \\ \varepsilon_w^{N_x,N_y,N_z} \end{bmatrix},$$

$$w = x, y, \text{ or } z. \quad (2.6)$$

また,  $D_x, D_y, D_z$  は  $x, y, z$  方向の差分作用素であり,  $e_w$  と  $h_w$  に作用させると以下のような差分式が求まる.

$$\begin{aligned} D_x^e e_w &= \frac{E_w^{i+1,j,k} - E_w^{i,j,k}}{\Delta x}, D_y^e e_w = \frac{E_w^{i,j+1,k} - E_w^{i,j,k}}{\Delta y}, \\ D_z^e e_w &= \frac{E_w^{i,j,k+1} - E_w^{i,j,k}}{\Delta z}, D_x^h h_w = \frac{H_w^{i+1,j,k} - H_w^{i,j,k}}{\Delta x}, \\ D_y^h h_w &= \frac{H_w^{i,j+1,k} - H_w^{i,j,k}}{\Delta y}, D_z^h h_w = \frac{H_w^{i,j,k+1} - H_w^{i,j,k}}{\Delta z}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

ここで,  $i = 1, 2, \dots, N_x, j = 1, 2, \dots, N_y, k = 1, 2, \dots, N_z$  である.

## 2.2 波動方程式の有限差分近似

SI 単位系を使用する際には電界と磁界が  $|\mathbf{E}|/|\mathbf{H}| = |\eta|$  の関係がある.  $\eta$  は平面波が媒質中に伝搬する際の波動インピーダンス  $\sqrt{\mu/\varepsilon}$  であり, 真空中では約  $377\Omega$  となる. この場合, 式(2.5)における係数行列の条件数が大きくなり, 線形方程式が悪条件であることを示す.  $\mathbf{E}' = \sqrt{\mu/\varepsilon}\mathbf{E}$  とする規格化で数値的な条件を改善することは可能であるが, 媒質境界面の処理は複雑になる.

式(2.4)の代わりに次式に示す電界及び磁界の波動方程式を用いることはこのような問題を解決する方法の一つである.

$$\nabla^h \times (\mu^{-1} \nabla^e \times \mathbf{E}) + s^2 \varepsilon \mathbf{E} = -s \mathbf{J} \quad (2.8-a)$$

$$\nabla^e \times (\varepsilon^{-1} \nabla^h \times \mathbf{H}) + s^2 \mu \mathbf{H} = \nabla \times \varepsilon^{-1} \mathbf{J} \quad (2.8-b)$$

上式のいずれも未知数として電界あるいは磁界しか存在しないため, 未知数のオーダー差による悪条件が解決される. もう一つの利点は式(2.4)に比べて式(2.10)の未知数は半分まで低減されることである. 式(2.10-a)によって電界  $\mathbf{E}$  を計算した場合, 磁界  $\mathbf{H}$  は既知の  $\mathbf{E}$  を式(2.1-b)に代入することで簡単に計算されるため, 計算全体の高速化が図れる. 式(2.10-a)を離散化すると以下に示す線形方程式が得られる.

$$\left( \begin{bmatrix} -D_y^{eh} - D_z^{eh} \mu_y & D_x^h D_y^e \mu_z & D_x^h D_z^e \mu_y \\ D_x^e D_y^h \mu_z & -D_x^{eh} \mu_z - D_z^{eh} \mu_x & D_y^h D_z^e \mu_x \\ D_x^e D_z^h \mu_y & D_y^e D_z^h \mu_x & -D_x^{eh} \mu_y - D_y^{eh} \mu_x \end{bmatrix} + s^2 \varepsilon' \right) \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} s J_x \\ s J_y \\ s J_z \end{bmatrix}, \quad (2.9)$$

ここで、 $\varepsilon' = \text{diag}(\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z)$ 、 $D_w^{eh} = D_w^e D_w^h$ である。式(2.11)の差分式で構成された線形方程式を解くことで、未知電磁界 $\mathbf{E}$ が求まる。方程式左辺の係数行列は二階の差分作用素で構成されており、以下の計算により導出することができる。

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} -D_z^e & D_y^e \\ D_z^e & -D_x^e \\ -D_y^e & D_x^e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_x \\ \mu_y \\ \mu_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -D_z^h & D_y^h \\ D_z^h & -D_x^h \\ -D_y^h & D_x^h \end{bmatrix} = \\ & \begin{bmatrix} -D_y^{eh} - D_z^{eh} \mu_y & D_x^h D_y^e \mu_z & D_x^h D_z^e \mu_y \\ D_x^e D_y^h \mu_z & -D_x^{eh} \mu_z - D_z^{eh} \mu_x & D_y^h D_z^e \mu_x \\ D_x^e D_z^h \mu_y & D_y^e D_z^h \mu_x & -D_x^{eh} \mu_y - D_y^{eh} \mu_x \end{bmatrix} \quad (2.10) \end{aligned}$$

また、この係数行列の差分要素を差分式に展開すると

$$D_x^{eh} E_w = \frac{E_w^{i+1,j,k} - 2E_w^{i,j,k} + E_w^{i-1,j,k}}{\Delta x^2}, w = y, z,$$

$$D_y^{eh} E_w = \frac{E_w^{i,j+1,k} - 2E_w^{i,j,k} + E_w^{i,j-1,k}}{\Delta y^2}, w = x, z,$$

$$D_z^{eh} E_w = \frac{E_w^{i,j,k+1} - 2E_w^{i,j,k} + E_w^{i,j,k-1}}{\Delta z^2}, w = x, y,$$

$$D_x^e D_y^h E_x = \frac{E_x^{i+1,j+1,k} + E_x^{i,j,k} - E_x^{i+1,j,k} - E_x^{i,j+1,k}}{\Delta x \Delta y},$$

$$D_x^h D_y^e E_y = \frac{E_y^{i+1,j+1,k} + E_y^{i,j,k} - E_y^{i+1,j,k} - E_y^{i,j+1,k}}{\Delta x \Delta y},$$

$$D_x^e D_z^h E_x = \frac{E_x^{i+1,j,k+1} + E_x^{i,j,k} - E_x^{i+1,j,k} - E_x^{i,j,k+1}}{\Delta x \Delta z},$$

$$D_x^h D_z^e E_z = \frac{E_z^{i+1,j+1,k} + E_z^{i,j,k} - E_z^{i+1,j,k} - E_z^{i,j,k+1}}{\Delta x \Delta z},$$

$$D_y^e D_z^h E_y = \frac{E_y^{i,j+1,k+1} + E_y^{i,j,k} - E_y^{i,j+1,k} - E_y^{i,j,k+1}}{\Delta y \Delta z},$$

$$D_y^h D_z^e E_z = \frac{E_z^{i,j+1,k+1} + E_z^{i,j,k} - E_z^{i,j+1,k} - E_z^{i,j,k+1}}{\Delta y \Delta z},$$

が得られる。

また、磁界 $\mathbf{H}$ に関する波動方程式も同様な手順で差分式に展開でき、以下に磁界 $\mathbf{H}$ に関する波動方程式を解く際の線形方程式を示す。

$$\left( \begin{bmatrix} -D_y^{eh} \varepsilon_z - D_z^{eh} \varepsilon_y & D_x^e D_y^h \varepsilon_z & D_x^e D_z^h \varepsilon_y \\ D_x^h D_y^e \varepsilon_z & -D_x^{eh} \varepsilon_z - D_z^{eh} \varepsilon_x & D_y^h D_z^e \varepsilon_x \\ D_x^h D_z^e \varepsilon_y & D_y^h D_z^e \varepsilon_x & -D_x^{eh} \varepsilon_y - D_y^{eh} \varepsilon_x \end{bmatrix} + s^2 \mu' \right) \begin{bmatrix} H_x \\ H_y \\ H_z \end{bmatrix} = \varepsilon'^{-1} \begin{bmatrix} J'_x \\ J'_y \\ J'_z \end{bmatrix}, \quad (2.11)$$

ここで、 $\mu' = \text{diag}(\mu_x, \mu_y, \mu_z)$ である。左辺の係数行列は

$$\begin{aligned}
 & \begin{bmatrix} -D_z^h & D_y^h \\ D_z^h & -D_x^h \\ -D_y^h & D_x^h \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -D_z^e & D_y^e \\ D_z^e & -D_x^e \\ -D_y^e & D_x^e \end{bmatrix} = \\
 & \begin{bmatrix} -D_y^{eh}\varepsilon_z - D_z^{eh}\varepsilon_y & D_x^e D_y^h \varepsilon_z & D_x^e D_z^h \varepsilon_y \\ D_x^h D_y^e \varepsilon_z & -D_x^{eh}\varepsilon_z - D_z^{eh}\varepsilon_x & D_y^e D_z^h \varepsilon_x \\ D_x^h D_z^e \varepsilon_y & D_y^h D_z^e \varepsilon_x & -D_x^{eh}\varepsilon_y - D_y^{eh}\varepsilon_x \end{bmatrix} \quad (2.12)
 \end{aligned}$$

により求める．この係数行列の差分要素を差分式に展開すると

$$D_x^{eh} h_w = \frac{H_w^{i+1,j,k} - 2H_w^{i,j,k} + H_w^{i-1,j,k}}{\Delta x^2}, w = y, z,$$

$$D_y^{eh} h_w = \frac{H_w^{i,j+1,k} - 2H_w^{i,j,k} + H_w^{i,j-1,k}}{\Delta y^2}, w = x, z,$$

$$D_z^{eh} H_w = \frac{H_w^{i,j,k+1} - H_w^{i,j,k} + H_w^{i,j,k-1}}{\Delta y^2}, w = x, y,$$

$$D_x^h D_y^e H_x = \frac{H_x^{i+1,j+1,k} + H_x^{i,j,k} - H_x^{i+1,j,k} - H_x^{i,j+1,k}}{\Delta x \Delta y},$$

$$D_x^e D_y^h H_y = \frac{H_y^{i+1,j+1,k} + H_y^{i,j,k} - H_y^{i+1,j,k} - H_y^{i,j+1,k}}{\Delta x \Delta y},$$

$$D_x^h D_z^e H_x = \frac{H_x^{i+1,j,k+1} + H_x^{i,j,k} - H_x^{i+1,j,k} - H_x^{i,j,k+1}}{\Delta x \Delta z},$$

$$D_x^e D_z^h H_z = \frac{H_z^{i+1,j+1,k} + H_z^{i,j,k} - H_z^{i+1,j,k} - H_z^{i,j,k+1}}{\Delta x \Delta z},$$

$$D_y^h D_z^e H_y = \frac{H_y^{i,j+1,k+1} + H_y^{i,j,k} - H_y^{i,j+1,k} - H_y^{i,j,k+1}}{\Delta y \Delta z},$$

$$D_y^e D_z^h H_z = \frac{H_z^{i,j+1,k+1} + H_z^{i,j,k} - H_z^{i,j+1,k} - H_z^{i,j,k+1}}{\Delta y \Delta z}.$$

### 2.3 吸収境界条件の実装

有限差分法では有限の解析領域を規定し、その範囲内で数値解析を行うため、電磁界の伝搬解析をシミュレーションする際に解析領域端部の人工的に作られた境界面から波の反射が発生する．しかし、この反射波は現実には起こり得ないものであり、電磁デバイスの設計などには支障をきたす．そのため、解析領域端部の境界面に電磁波を吸収する吸収境界条件(ABC: Absorbing Boundary Condition)[33, 34]を加えることによって、疑似的に無限に広い空間を実現するのは有限差分法で電磁界解析を行う際の非常に重要な技術である．吸収境界条件によって解析領域端部の境界面に入射した電磁エネルギーはすべて解析領域外に流出するように設定することができる．

吸収境界条件の実装として様々な手法とテクニックが提案されており、大きく 2 種類に分けることができる。その一つは境界面の反射係数が 0 になるような微分方程式を解くことによって境界面上の電磁界を決める Differential-based ABC であり、Mur の境界条件[35, 36] が最も一般的なものである。もう一つは境界面の外側に電磁波を吸収できる仮想的な媒質を複数層設置し、入射した電磁エネルギーを徐々に減衰させる Material-based ABC であり、Berenger 氏が提案した PML(Perfectly Matched Layer) [37, 38]が代表的なものである。Mur の境界条件は実装が容易である特徴があるが、入射角の増大に連れて吸収性能が PML に比べて大きく劣り、 $90^\circ$  に近づくとほぼ 100%の反射率を示す。そのため、すべて入射角で低い反射率を示す PML がより広く使われている。PML にも欠点が存在し、PML は ABC の層に比べ波長が非常に長い波と特殊な性質を持つエバネッセント波を減衰させることができない。そのため、エバネッセント波が十分に減衰するまで吸収境界を散乱物からより離れた距離に設置する必要があるため、計算の効率が大幅に低下する。この欠点を解決する手法として、Kuzuoglu 氏と Mittra 氏が 1996 年に複素周波数シフト(Complex Frequency Shift: CFS)PML[39-41]を提案した。CFS-PML は拡張した座標系で定式化したものであり、低周波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。プラズモニックデバイス設計ではナノ金属からエバネッセント波が発生するために、本論文の解析では CFS-PML を採用した。また、CFS-PML は unsplit 型の PML であり、Berenger-PML のように各方向の電磁界要素を分離してから導電率・導磁率を設定する必要がないため、線形方程式の未知数が少なく、計算がより高速になる。

次に、FDCFD における CFS-PML の実装方法について述べる。CFS-PML を FDCFD に適用する際は式波動方程式のナブラ演算子  $\nabla^h$ ,  $\nabla^e$  を以下の  $\nabla_c^h$ ,  $\nabla_c^e$  に置き換える。

$$\begin{aligned}
 & \nabla_c^h \times (\mu^{-1} \nabla_c^e \times \mathbf{E}) + s^2 \varepsilon \mathbf{E} = -s \mathbf{J} \\
 & \nabla_c^w = \frac{\partial}{c_x \partial x} \mathbf{a}_x + \frac{\partial}{c_y \partial y} \mathbf{a}_y + \frac{\partial}{c_z \partial z} \mathbf{a}_z, w = e, h, \\
 & c_w = \kappa_w + \frac{\sigma_w}{\alpha_w + s \varepsilon_0}, w = x, y, \text{ or } z,
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

ここで、

$$\begin{aligned}
 \sigma_w(l) &= \frac{-(M+1) \log(\delta_c)}{2 \Delta L \sqrt{\mu_0 / \varepsilon_0}} \left( \frac{l}{L} \right)^M, \kappa_w(l) = 1 + (\kappa_{\max} - 1) \left( \frac{l}{L} \right)^M, \\
 \alpha_w(l) &= \alpha_{\max} \left( \frac{L-l}{L} \right)^M, l = 1, 2, 3, \dots, L.
 \end{aligned}$$

$\delta_c$  は PML の目標吸収率、 $\Delta$  は PML 層の厚み、 $L$  は層数を表す。 $M$  は PML 各層の減衰率の変化を決める係数であり、一般的に 2 から 4 に設定する。 $\kappa_{\max}$  と  $\alpha_{\max}$  は CFS-PML の係数である[41]。また、 $\sigma_w$ ,  $\alpha_w$  は正の実数であり、 $\kappa_w$  は常に 1 より大きい実数である。これを差分式に適用すると式(2.9)は以下のようなになる。

$$\begin{pmatrix} -D_y^{eh'} \mu_z - D_z^{eh'} \mu_y & D_x^{h'} D_y^{e'} \mu_z & D_x^{h'} D_z^{e'} \mu_y \\ D_x^{e'} D_y^{h'} \mu_z & -D_x^{eh'} \mu_z - D_z^{eh'} \mu_x & D_y^{h'} D_z^{e'} \mu_x \\ D_x^{e'} D_z^{h'} \mu_y & D_y^{e'} D_z^{h'} \mu_x & -D_x^{eh'} \mu_y - D_y^{eh'} \mu_x \end{pmatrix} + s^2 \varepsilon' \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} S J_x \\ S J_y \\ S J_z \end{pmatrix},$$

$$D_x^{eh'} E_w = \frac{1}{c_x^{i-0.5,j,k} \Delta x^2} \left( \frac{E_w^{i+1,j,k} - E_w^{i,j,k}}{c_x^{i,j,k}} - \frac{E_w^{i,j,k} - E_w^{i-1,j,k}}{c_x^{i-1,j,k}} \right), w = y, z,$$

$$D_y^{eh'} E_w = \frac{1}{c_y^{i,j-0.5,k} \Delta y^2} \left( \frac{E_w^{i,j+1,k} - E_w^{i,j,k}}{c_y^{i,j,k}} - \frac{E_w^{i,j,k} - E_w^{i,j-1,k}}{c_y^{i,j-1,k}} \right), w = x, z,$$

$$D_z^{eh'} E_w = \frac{1}{c_z^{i,j,k-0.5} \Delta z^2} \left( \frac{E_w^{i,j,k+1} - E_w^{i,j,k}}{c_z^{i,j,k}} - \frac{E_w^{i,j,k} - E_w^{i,j,k-1}}{c_z^{i,j,k-1}} \right), w = x, y,$$

$$D_x^{e'} D_y^{h'} E_x = \frac{E_x^{i+1,j+1,k} + E_x^{i,j,k} - E_x^{i+1,j,k} - E_x^{i,j+1,k}}{c_x^{i,j+0.5,k} c_y^{i,j,k} \Delta x \Delta y},$$

$$D_x^{h'} D_y^{e'} E_y = \frac{E_y^{i+1,j+1,k} + E_y^{i,j,k} - E_y^{i+1,j,k} - E_y^{i,j+1,k}}{c_x^{i,j,k} c_y^{i,j+0.5,k} \Delta x \Delta y},$$

$$D_x^{e'} D_z^{h'} E_x = \frac{E_x^{i+1,j,k+1} + E_x^{i,j,k} - E_x^{i+1,j,k} - E_x^{i,j,k+1}}{c_x^{i,j+0.5,k} c_z^{i,j,k} \Delta x \Delta z},$$

$$D_x^{h'} D_z^{e'} E_z = \frac{E_z^{i+1,j+1,k} + E_z^{i,j,k} - E_z^{i+1,j,k} - E_z^{i,j,k+1}}{c_x^{i,j,k} c_z^{i,j,k+0.5} \Delta x \Delta z},$$

$$D_y^{e'} D_z^{h'} E_y = \frac{E_y^{i,j+1,k+1} + E_y^{i,j,k} - E_y^{i,j+1,k} - E_y^{i,j,k+1}}{c_y^{i,j+0.5,k} c_z^{i,j,k} \Delta y \Delta z},$$

$$D_y^{h'} D_z^{e'} E_z = \frac{E_z^{i,j+1,k+1} + E_z^{i,j,k} - E_z^{i,j+1,k} - E_z^{i,j,k+1}}{c_y^{i,j,k} c_z^{i,j+0.5,k} \Delta y \Delta z},$$

ここで、 $c_w^{i,j,k}$ は点 $r^{i,j,k}$ でのセルにおける PML 媒質係数である。

## 2.4 分散性モデルの実装

異なる周波数をもつ電磁波入射に対して、伝搬媒質の誘電率・透磁率は異なる特性を示すため、物質内に伝搬する電磁波をシミュレーションする際は物理特性の周波数分散を考慮しなければならない。本論文では主に可視光と近赤外光領域を扱っており、この帯域では媒質の非透磁率 $\mu_r$ はほぼ $1 + j0$ となるため、解析領域内の透磁率 $\mu$ は一様に $\mu_0$ と近似することができる。一方、金属などの媒質において、誘電率はこの帯域では激しく変化するため、その分散性を無視することができなく、電子の運動モデルを用いて媒質の複素比誘電率 $\varepsilon_r$ を計算する必要がある。自由電子の衝突のみを考慮した Drude モデルと電子の原子核による束縛を考慮した Lorentz モデル、また、両者を掛け合わせた Lorentz-Drude モデル[42]などが物性を記述するモデルとして提案されている。可視光帯域を扱う場合、Lorentz-Drude モデルで物質内における電子のふるまいをシミュレーションするのが有効であることは既に検証されており、様々な領域で広く使われている[42-44]。次式に電子の衝突と原子核の束縛を考

慮した Lorentz-Drude モデルの電子の運動方程式を示す.

$$m_e \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} + m_e \Gamma_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + m_e \omega_0 \mathbf{u} = -e \mathbf{E}, \quad (2.14)$$

ここで, 束縛電子の位置は $\mathbf{u}$ , 有効質量は $m_e$ , 電子衝突の減衰定数は $\Gamma_0$ , 束縛の固有振動角周波数は $\omega_0$ ,  $n_e, e$ は電子密度と電子の電荷を表す. また,  $\mathbf{E}$ と $\mathbf{u}$ に $e^{st}$ の時間因子を仮定し, 束縛電子の位置 $\mathbf{u}$ を求めてから比誘電率を求めると

$$\varepsilon_r(s) = \varepsilon_\infty + \frac{\omega_p^2}{s^2 + s\Gamma_0 + \omega_0^2}, \quad (2.15)$$

が得られる. ここで,  $\varepsilon_\infty$ は周波数が無限大となる際の比誘電率であり, 一般的に $\varepsilon_\infty = 1$ とみなせる. プラズマ周波数 $\omega_p = \sqrt{N_e e^2 / m_e \varepsilon_0}$ の関係式を満たす.  $N_e$ は電子密度を表す. また, 電界 $\mathbf{E}$ が印加された際に電束密度 $\mathbf{D}$ と電気分極 $\mathbf{P}$ は以下と考える.

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad (2.16)$$

ここで,  $\mathbf{P} = N_e q \mathbf{u}$ である.

複数の束縛電子による振動が存在する場合, 比誘電率は次式で計算できる.

$$\varepsilon_r(s) = \varepsilon_\infty + \sum_{j=0}^N \frac{f_j \omega_p^2}{s^2 + s\Gamma_j + \omega_j^2} \quad (2.17)$$

但し,  $f_j, \omega_j, \Gamma_j$ はそれぞれ各振動子の強度, 固有振動周波数, 電子衝突の減衰定数を示す.

Lorentz-Drude モデルでは電子の衝突と原子核による束縛を計算し, 媒質誘電率の周波数分散性を再現できるが, 電子の間に働く力が考慮されていない. 特に, 物質のサイズがサブ波長以下の場合, 電子間の力による効果がより強く現れ, 誘電率が空間についても分散的になる. 即ち, 電子の応答は非局所的[45]であり, ナノスケールにおいて物質と電磁界の相互作用を計算する際は誘電率の空間分散性も考慮する必要がある. 実際に, ナノサイズの微小金属球構造を扱う実験では, 解析結果と実験値が一致しない例も既に報告されている[46, 47].

電子間に働く力を考慮するには Schrodinger 方程式と Maxwell 方程式を連立に解き, 量子効果を考慮した上, 物質と電磁界の相互作用を求めることが理想的である[48-50]. しかし, 実際問題を計算する際は, 一般的なスケールが数十から数百ナノメートルであり, 数十億個の原子を含む系になってしまう. そのため, このような計算において完全な量子力学的な処理が非現実的であることは明らかであり, 一連の近似を導入することで計算量を削減しなければならないのが現状である.

近年, 自由電子モデルに電子の圧力項を導入し, 電子の応答を流体力学的に扱う Hydrodynamic Drude モデル[51]が提案されている. このモデルの導入によって, 数値計算の結果が実験と定性的, 定量的に一致することが証明された[51]. 次式に Hydrodynamic Drude モデルの電子運動方程式を示す.

$$m_e n_e \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + m_e n_e \Gamma_0 \mathbf{v} + m_e n_e (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -n_e e (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \nabla p, \quad (2.18)$$

ここで、 $\mathbf{v}$ は電子の流速であり、 $p$ は電子が受ける圧力を表す。また、電流 $\mathbf{J}$ を式(2.19)と定義し、式(2.20)電流連続の法則を用いると式(2.18)を式(2.21)に書き換える。

$$\mathbf{J} = -n_e e \mathbf{v}, \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{J}, \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} - \frac{\mathbf{J}}{n_e e} \nabla \cdot \mathbf{J} - \mathbf{J} \cdot \nabla \frac{\mathbf{J}}{n_e e} - \Gamma_0 \mathbf{J} = \frac{n_e e^2}{m_e} \mathbf{E} - \frac{e}{m_e} \mathbf{J} \times \mathbf{B} + \frac{e}{m_e} \nabla p, \quad (2.21)$$

高次の項を無視し、電流を $\mathbf{J} = \partial \mathbf{P} / t$ と定義すると式(2.21)を次式に変形できる。

$$\frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2} + \Gamma_0 \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = \frac{n_e e^2}{m_e} \mathbf{E} + \frac{e}{m_e} \nabla p, \quad (2.22)$$

この式をさらに展開するために、トーマス・フェルミ理論[52, 53]を用いて、圧力 $p$ と電子密度 $n_e$ の関係を以下の式で表す。

$$p = \xi n_e^{\frac{5}{3}}, \quad (2.23 - a)$$

$$\xi = \frac{(3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \hbar^2}{5m_e}, \quad (2.23 - b)$$

ここで、 $\hbar$ は換算プランク定数である。また、電流連続の式(2.20)を積分すると、

$$n_e = \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{P} + n_{e0}, \quad (2.24)$$

が求められる。ここで、 $n_{e0}$ は平衡状態における電子密度である。これらを式(2.22)に代入すると

$$\frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2} + \Gamma_0 \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} - \beta^2 \nabla (\nabla \cdot \mathbf{P}) - \varepsilon_0 \omega_p^2 \mathbf{E} = 0, \quad (2.25)$$

となる。また、時間因子を $e^{st}$ と仮定し

$$(s^2 + s\Gamma_0) \mathbf{P} - \beta^2 \nabla (\nabla \cdot \mathbf{P}) - \varepsilon_0 \omega_p^2 \mathbf{E} = 0, \quad (2.26)$$

が得られる。ここで、

$$\omega_p = \sqrt{\frac{n_e e^2}{\varepsilon_0 m_e}}, \quad \beta = \sqrt{\frac{5}{3} \frac{n_e^{\frac{2}{3}}}{m_e}} \xi,$$

この式を電界 $\mathbf{E}$ に関する波動方程式と連立に解くことによって、電子応答の非局所効果を考慮することができる。この場合、FDCFDにおける線形方程式は次式となる。

$$\begin{bmatrix} (\nabla_c^h \times \mu^{-1} \nabla_c^e \times) + s^2 \varepsilon'_0 & s' \\ (-\varepsilon_0 \omega_p^2)' & \beta^2 (\nabla \nabla \cdot) + (s^2 + s\Gamma_0)' \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{P} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -s\mathbf{J} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.27)$$

ここで、 $\varepsilon'_0 = \text{diag}(\varepsilon_0)$ ,  $(-\varepsilon_0 \omega_p^2)' = \text{diag}(-\varepsilon_0 \omega_p^2)$ ,  $s' = \text{diag}(s^2)$ ,  $(s^2 + s\Gamma_0)' = \text{diag}(s^2 + s\Gamma_0)$



である。また、 $(\nabla_c^h \times \mu^{-1} \nabla_c^e \times)$ は式(2.10-a)と同様に差分式に変形することができ、 $(\nabla \nabla \cdot)$ は以下のように展開できる。

$$\nabla \nabla \cdot = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x^2} & \frac{\partial}{\partial x \partial y} & \frac{\partial}{\partial x \partial z} \\ \frac{\partial}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2}{\partial y^2} & \frac{\partial}{\partial y \partial z} \\ \frac{\partial}{\partial x \partial z} & \frac{\partial}{\partial y \partial z} & \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{bmatrix}, \quad (2.28)$$

これを分極 $\mathbf{P}$ に作用させる場合は以下の差分式が求まる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_x &= \frac{P_x^{i+1,j,k} - 2P_x^{i,j,k} + P_x^{i-1,j,k}}{\Delta x^2}, \\ \frac{\partial^2}{\partial y^2} P_y &= \frac{P_y^{i,j+1,k} - 2P_y^{i,j,k} + P_y^{i,j-1,k}}{\Delta y^2}, \\ \frac{\partial^2}{\partial z^2} P_z &= \frac{P_z^{i,j,k+1} - 2P_z^{i,j,k} + P_z^{i,j,k-1}}{\Delta z^2}, \\ \frac{\partial}{\partial x \partial y} P_x &= \frac{P_x^{i+1,j,k} - P_x^{i+1,j-1,k} - P_x^{i,j,k} + P_x^{i-1,j,k}}{\Delta x \Delta y}, \\ \frac{\partial}{\partial x \partial y} P_y &= \frac{P_y^{i+1,j,k} - P_y^{i+1,j-1,k} - P_y^{i,j,k} + P_y^{i-1,j,k}}{\Delta x \Delta y}, \\ \frac{\partial}{\partial x \partial z} P_x &= \frac{P_x^{i+1,j,k} - P_x^{i+1,j,k-1} - P_x^{i,j,k} + P_x^{i-1,j,k}}{\Delta x \Delta z}, \\ \frac{\partial}{\partial x \partial z} P_z &= \frac{P_z^{i+1,j,k} - P_z^{i+1,j,k-1} - P_z^{i,j,k} + P_z^{i-1,j,k}}{\Delta x \Delta z}, \\ \frac{\partial}{\partial y \partial z} P_y &= \frac{P_y^{i,j+1,k} - P_y^{i,j+1,k-1} - P_y^{i,j,k} + P_y^{i,j-1,k}}{\Delta y \Delta z}, \\ \frac{\partial}{\partial y \partial z} P_z &= \frac{P_z^{i,j+1,k} - P_z^{i,j+1,k-1} - P_z^{i,j,k} + P_z^{i,j-1,k}}{\Delta y \Delta z}. \end{aligned}$$

## 2.5 高速逆 Laplace 変換を併用した時間応答解析

本研究では、FDCFD と高速逆 Laplace 変換法(Fast Inverse Laplace Transform: FILT)を組み合わせた FDCFD-FILT により、電磁界の時間応答解析を行う。FILT は逆 Laplace 変換[54-57]を数値的に行うための強力な手法として知られている。複素平面で有限の特異点を計算することにより、任意時刻での応答を求める。これまでに、線路解析[58]、電磁波散乱解析[59-61]、地中レーダー[62]、超高速磁気記録用アンテナの設計[28]などの応用まで、報告例がある。本論文では、複素周波数領域有限差分法で求めた電磁界を、高速逆 Laplace 変換法を用いて時間領域に変換する。ここでは FILT の理論について簡単に紹介する。

FILT では、先ず指数関数を以下のような双曲線関数[57]で近似する。

$$e^{st} \approx E_{ec}(t, \alpha) = \frac{e^\alpha}{2 \cosh(\alpha - st)}, \quad (2.29)$$

さらに、留数定理を用いて、式(2.30)に示す Bromwich 積分を複素平面における特異点 $s$ の周りに変換し、FILT の理論式である式(2.31)を導出する。

$$f(t) = \frac{1}{2\pi j} \int_{\beta-j\infty}^{\beta+j\infty} F(s)e^{st} ds \quad (2.30)$$

$$f(t) \approx f_{ec}(t, \alpha) = \frac{e^\alpha}{t} \sum_{n=1}^{\infty} F_n(s), \quad (2.31)$$

ここで、

$$F_n = (-1)^n \text{Im}[F(s)], s = \frac{\alpha + j(n - 0.5)\pi}{t} \quad (2.32)$$

$F(s)$ は時間関数 $f(t)$ の像関数を表す、係数 $\alpha$ は FILT の近似パラメータであり、おおよそ $10^{-a}$ の精度が保証される[26].

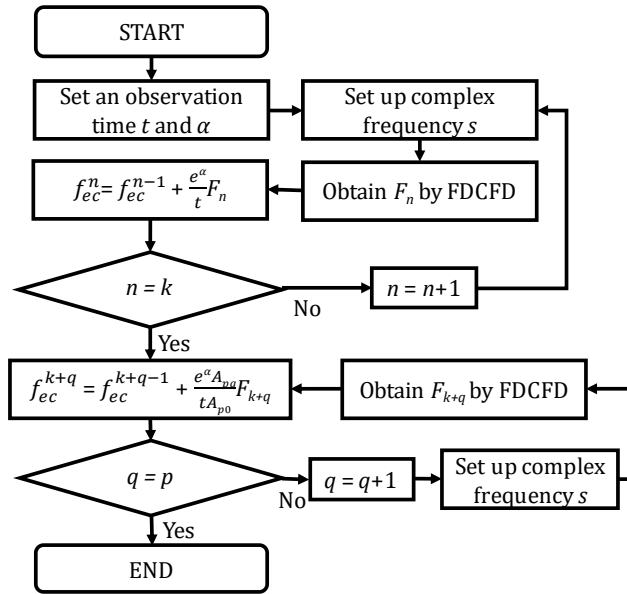


図 2.4 FDCFD-FILT アルゴリズムのフローチャート

数値解析を行う際、無限級数を有限で打ち切る必要がある。級数に対する収束を加速させるために、Euler 変換を適用する。実際の逆変換を行う際は以下の式を用いる。

$$f_{ec}(t, \alpha) = \frac{e^\alpha}{t} \left( \sum_{n=1}^k F_n + \frac{1}{A_{p0}} \sum_{q=1}^p A_{pq} F_{k+q} \right), \quad (2.33)$$

ここで、

$$A_{pp} = 1, A_{p0} = 2^p, A_{pq} = A_{p, q-1} - \frac{(p+1)!}{q!(p+1-q)!} \quad (2.34)$$

$k$ は無限級数の打ち切り項数,  $p$ は収束を加速するためのEuler変換の項数である.

FDCFD と組み合わせることで電磁界の時間応答を求めるアルゴリズムを図 2.4 に示す. まず観測時間 $t$ と誤差パラメータ $a$ を設定し,  $s$ の値を計算する. 次に, 式(2.11)に示す線形方程式を解くことによって $s$ 領域における電磁界を求める. この手順を $k + p$ 回繰り返し, 解析結果を式(2.33)に代入することで観測時間 $t$ における電磁界の時間応答が求まる. また,  $k$ 及び $p$ の値は数値の収束判定を行うことによって決まる. この際に処理すべき特異点の分布を図 2.5 に示す. 実部 $a/t$ の軸に沿って虚軸のプラス方向に向かって複数の特異点が存在する.

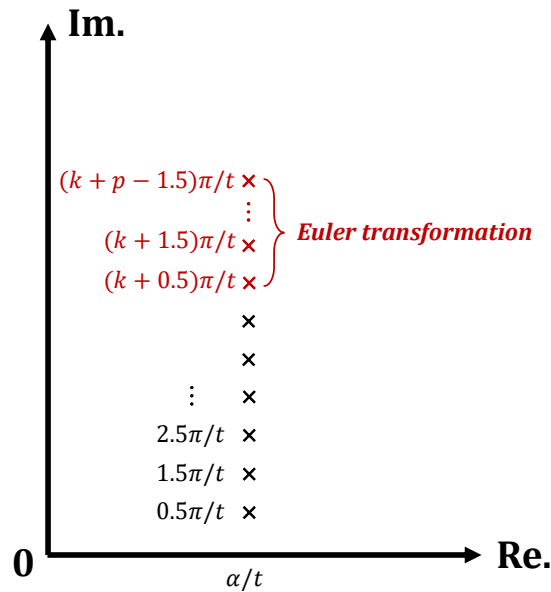


図 2.5 複素平面における特異点の分布

## 2.6 数値解析の信頼性

本節では, ナノ金属円柱による電磁波の散乱問題を解析し, 解析結果を厳密解及び時間領域有限差分法(Finite-Difference Time-Domain: FDTD)と比較することによって, FDCFD の計算精度を検証する. 図 2.2 に検証で使用するナノ金属円柱の解析モデルを示す.  $z$ 軸に一様な金の円柱を解析領域中心に配置し,  $+y$ 方向に平面波が入射される. また, 散乱電磁波の状態は円柱近傍にある点で観測する.

まず,  $s = j\omega$ としたときの波長応答について解析する. 半径 $r = 5 \text{ nm}$ のナノ金属円柱に平面波を入射する場合, 円柱表面における電界強度の波長応答を図 2.3 に示す. 入射波長 $\lambda = 540 \text{ nm}$ 付近で最も強くなり, 表面プラズモンの励振が確認できた. 本手法による解析結果は実線に示す厳密解と図上でよく一致しており, 相対誤差が 1%以下であることを確認した. また, 差分近似のセルサイズは $0.1 \times 0.1 \text{ nm}$ とした.

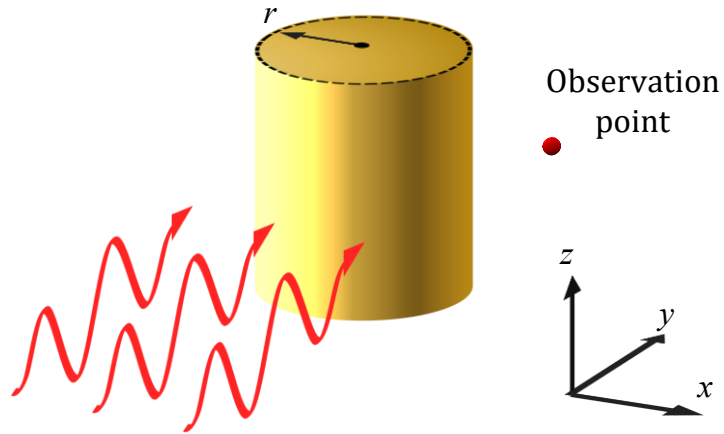


図 2.2 ナノ金属円柱の解析モデル

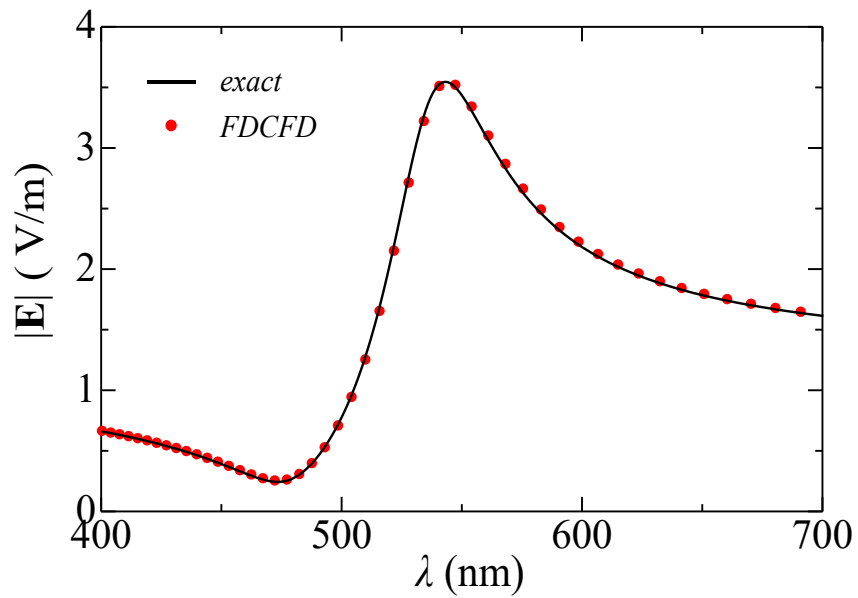


図 2.3 電界強度の波長応答

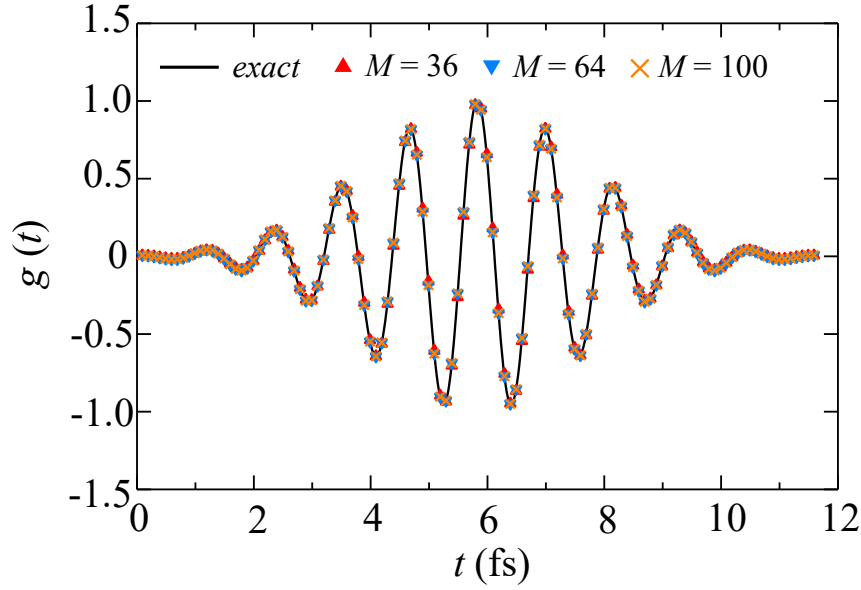


図 2.6 変調 Gaussian パルス

次に、FDCFD-FILT による時間応答解析の計算精度を検証するため、ナノ金属柱に疑似変調 Gaussian パルスを入射するときの時間応答を求めた。疑似変調 Gaussian パルスの像関数を求めるため、次式に示す近似関数を導出した[4].

$$g(t) = 2^{-M_g} \sum_{i=0}^{M_g} (-1)^{k-\frac{M_g}{2}} C(M_g, i) \cdot \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{2} \cos \left[ (\alpha + \beta)t - \frac{1}{2}t_w \right] \\ + \frac{1}{2} \sin \left[ (\alpha - \beta)t + \frac{1}{2}t_w \right] \end{array} \right\} \cdot [u(t) - u(t - t_w)] \quad (2.35 - a)$$

$$\alpha = \frac{2i - M_g}{\Omega_g \sqrt{M_g}}, \beta = \omega_m \quad (2.35 - b)$$

ここで、 $M_g$ は無級数の打ち切り項数、 $C(M, i)$ は二項係数、 $\Omega_g$ は Gaussian 関数の分散、 $\omega_m$ は変調周波数、 $t_w$ は疑似変調 Gaussian パルスのパルス幅である。また、複素周波数領域における像関数は

$$G(s) = 2^{-M} \sum_{i=0}^{M_g} (-1)^{k-\frac{M_g}{2}} C(M_g, i) \cdot \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{2} \cos \left( \frac{1}{2} \beta t_w \right) \cdot \left[ \frac{s}{s^2 + (\alpha + \beta)^2} + \frac{s}{s^2 + (\alpha - \beta)^2} \right] \\ + \frac{1}{2} \sin \left( \frac{1}{2} \beta t_w \right) \cdot \left[ \frac{\alpha + \beta}{s^2 + (\alpha + \beta)^2} + \frac{\alpha - \beta}{s^2 + (\alpha - \beta)^2} \right] \end{array} \right\} \cdot [1 - e^{-t_w s}] \quad (2.36)$$

となる。図 2.6 に近似関数を用いたときの波形を示す。分散  $\Omega_g = 1.86 \times 10^{-15}$ 、変調角周波数  $\omega_m = 5.38 \times 10^{15}$  rad/s とした。また、打ち切り項数  $M > 64$  の場合、理論値との相対誤差が  $10^{-4}$  になることを確認した。

図 2.7 に変調 Gaussian パルス入射による電界  $E_y$  の時間応答を示す。パルスに含まれる共鳴周波数成分により表面プラズモンが励振され、電界は最大 2.5 倍程度に増幅された。またパルス通過後の応答は徐々に緩和する。解析結果をプラズモニクデバイスの設計で広く

使われる FDTD[14]と比較した。図 2.8 は  $t = 15 \sim 20\text{fs}$ における時間応答波形の拡大図である。追加した×印は、時間間隔を  $0.01\text{fs}$  から 20 倍の  $0.2\text{fs}$  まで延ばしたときの解析結果である。FDCFD-FILT と FDTD の解析結果を比較すると、相対誤差は  $0.1\%$ 以下となることを確認した。また、FDCFD-FILT は安定条件の制限がないため、時間間隔  $\Delta t$  を変化させた二つの結果は計算精度の範囲で完全に一致している。

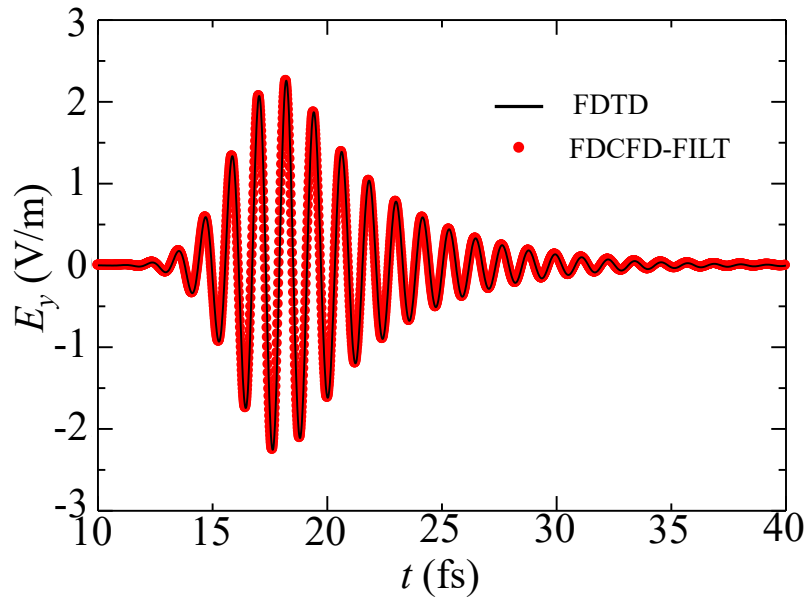


図 2.7 変調 Gaussian パルス入射による円柱表面における電界の時間応答波形

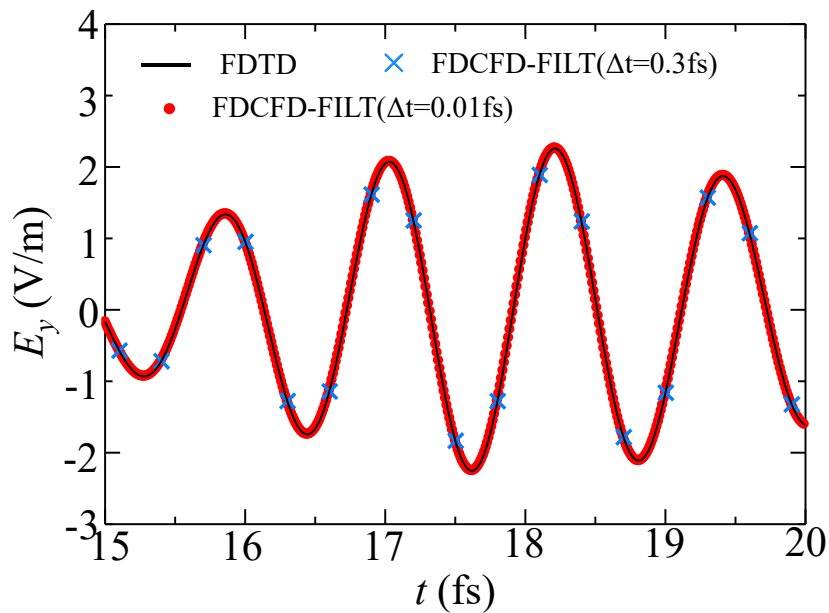


図 2.8 変調 Gaussian パルス入射による円柱表面における電界の時間応答波形の拡大

本手法は過渡応答と定常応答いずれも効率的に求められることを検証するために、正弦波入射の解析を行った。図 2.9 に FDCFD-FILT で解析した  $t = 0 \sim 20\text{fs}$  における電界の時間応答波形を示す。表面プラズモンの励振に伴い、電界は徐々に増幅する。定常状態における時間応答は、波長応答解析の結果に  $e^{j\omega t}$  を掛け時間  $t$  を変化させることで求められる。図 2.10 に  $t = t_s \sim t_s + 20\text{fs}$  における電界の時間応答波形を示す。ここで、 $t_s$  は定常応答での初期位相に対応する任意時刻である。過渡応答解析と定常応答解析の解析結果はいずれも時間領域有限差分法とよく一致していることが確認できた。

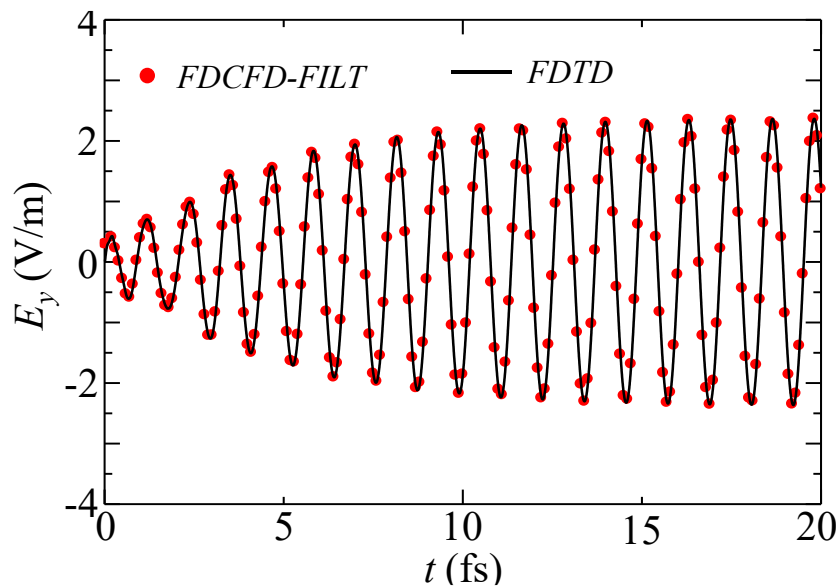


図 2.9 正弦波入射によるナノ金属円柱表面における電界の過渡応答

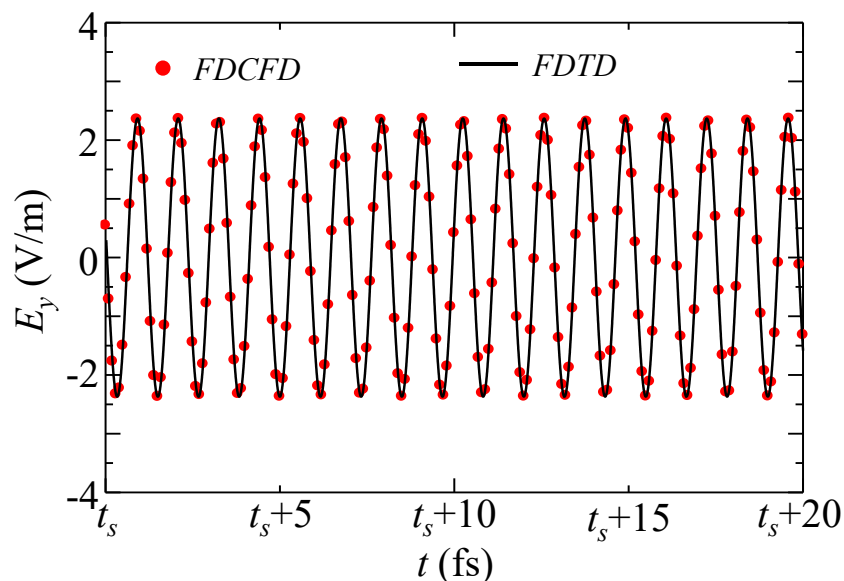


図 2.10 正弦波入射によるナノ金属円柱表面における電界の定常応答

図 2.11 に近似パラメータ $\alpha$ を 2 から 5 まで変化させ、式(2.31)における無限級数の打ち切り項数 $k$ に対する収束を示す。ここで Euler 変換の項数は $p = 5$ とした。近似パラメータ $\alpha$ を増やすと時間領域有限差分法の解析結果に漸近し、今回の解析では 4 桁程度一致した。

図 2.12 に Euler 変換の項数 $p$ を変化させた際の収束を示す。 $p = 0$ の場合では、 $k = 30$ における相対誤差は $10^{-1}$ 程度であるのに対し、 $p = 5$ の場合は $10^{-6}$ 程度まで収束する。

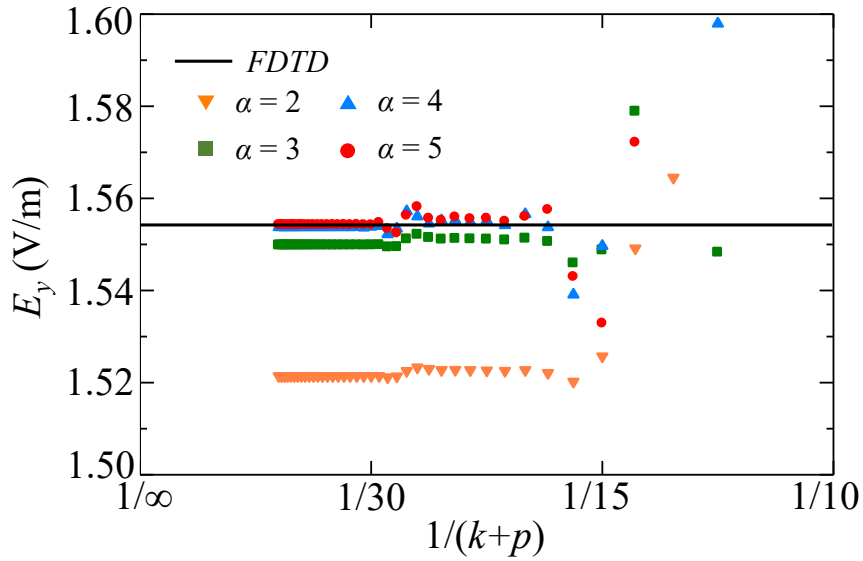


図 2.11 近似パラメータ  $\alpha$  に対する計算精度

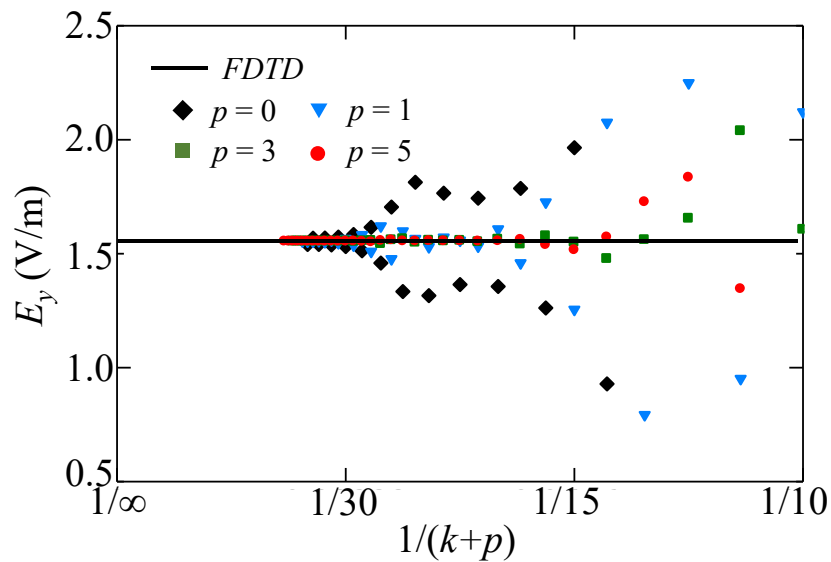


図 2.12 Euler 変換の項数  $p$  と計算精度



## 第 3 章

# 時間応答解析の高速化及び並列計算

## 3.1 マルチレベルの解析領域分割

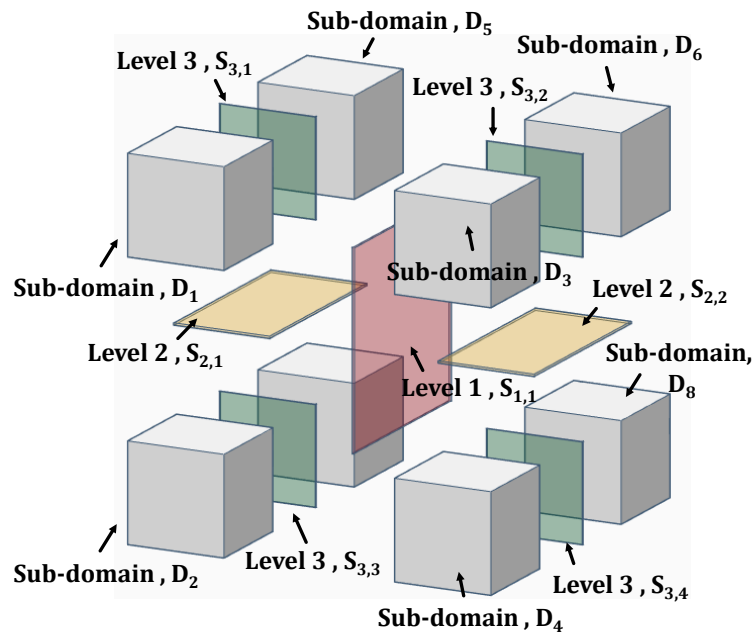


図 3.1 複素周波数領域有限差分法におけるマルチレベルの領域分割

2 章で述べた複素周波数領域有限差分法(Finite-Difference Complex-Frequency-Domain: FDCFD)では、線形方程式を解くことによって未知電磁界を求めるが、この線形方程式を反復法[33]で求解する際に解の収束が非常に遅くなる場合が存在する。係数行列に前処理などを適用することで、収束を早めることができるが、異なる解析モデルに対して適切な前処理が必要とされるため、汎用性を持つ前処理の開発が困難である。ガウスの消去法に基づく直接法を用いることで、一定の演算量で線形方程式の解を求められるが、その際に係数行列のスパース性が極端に低下するため、所要メモリと計算時間が膨大になる。

FDCFD における線形方程式を直接法で解く際の計算コストを抑えるために、解析領域のマルチレベル分割[62, 63]とシュアー補行列[64, 65]を組み合わせた手法を開発した。この手法では、まず分割面を設けることで、解析領域の 2 分割を複数回繰り返し、小さいサブ領域を作成する。その後、サブ領域と分割面を順番に並び替えることで、新しい係数行列を作る。最後に、シュアー補行列で線形方程式を縮小してから、直接法で各サブ領域を順番に解いていく。この際に処理が必要の係数行列はすべて小規模なものになるため、直接法で簡単に解くことができる。

解析領域の分割を3回行った際のサブ領域と分割面を図3.1に示す. この場合, 分割が3回行われたため, 解析領域が同じサイズを持つ8個のサブ領域と分割された. ここで, 中央にある赤の面は1回目の分割面, 黄色い面は2回目の分割面, 緑の面は3回の分割面であり, これらに対応する分割の処理をレベル1, レベル2, レベル3の分割と定義する.

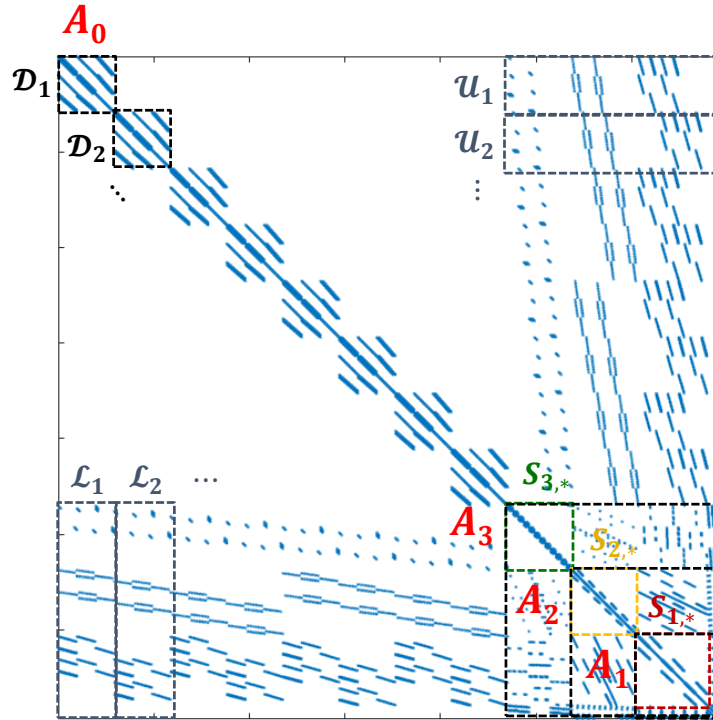


図 3.2 マルチレベル領域分割を用いた際の係数行列の非ゼロ成分

図 3.2 はセル数が  $16 \times 16 \times 16$  の解析領域をレベル3まで領域分割する際の係数行列である.  $\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2, \dots$  は分割されたサブ領域に対応するサブ行列であり,  $\mathcal{S}_3, \mathcal{S}_2, \mathcal{S}_1$  はそれぞれレベル3, 2, 1の分割面に対応するものである. 上三角と下三角にある  $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots$  と  $\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2, \dots$  は各サブ領域と分割面を連結させる成分である. このとき, FDCFD の線形方程式は以下となる.

$$\mathbf{A}_0 \mathbf{x}_0 = \mathbf{b}_0, \tag{3.1}$$

$$\mathbf{A}_0 = \begin{bmatrix} \mathcal{D}_1 & & & & & \\ & \mathcal{D}_2 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \mathcal{D}_8 & & \\ \mathcal{L}_1 & \mathcal{L}_2 & \dots & & & \end{bmatrix}, \mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \vdots \\ x_{\mathcal{D}_8} \\ x_{\mathcal{A}_3} \end{bmatrix}, \mathbf{b}_0 = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_{\mathcal{D}_1} \\ \mathbf{b}_{\mathcal{D}_2} \\ \vdots \\ \mathbf{b}_{\mathcal{D}_8} \\ \mathbf{b}_{\mathcal{A}_3} \end{bmatrix}. \tag{3.2}$$

ここで,

$$\mathbf{A}_3 = \begin{bmatrix} \mathcal{S}_{3,4} & & & & \\ & \mathcal{S}_{3,3} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \mathcal{S}_{3,1} & \\ \mathcal{L}_{3,4} & \mathcal{L}_{3,3} & \dots & & \end{bmatrix}, \mathbf{x}_{\mathcal{A}_3} = \begin{bmatrix} x_{\mathcal{S}_{3,4}} \\ x_{\mathcal{S}_{3,3}} \\ \vdots \\ x_{\mathcal{S}_{3,1}} \\ x_{\mathcal{A}_2} \end{bmatrix}, \mathbf{b}_{\mathcal{A}_3} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_{\mathcal{S}_{3,4}} \\ \mathbf{b}_{\mathcal{S}_{3,3}} \\ \vdots \\ \mathbf{b}_{\mathcal{S}_{3,1}} \\ \mathbf{b}_{\mathcal{A}_2} \end{bmatrix}, \tag{3.3}$$

$$\mathbf{A}_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{2,2} & & \mathbf{U}_{2,2} \\ & \mathbf{S}_{2,1} & \mathbf{U}_{2,1} \\ \mathcal{L}_{2,2} & \mathcal{L}_{2,1} & \mathbf{A}_1 \end{bmatrix}, \mathbf{x}_{A_2} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{S_{2,2}} \\ \mathbf{x}_{S_{2,1}} \\ \mathbf{x}_{A_1} \end{bmatrix}, \mathbf{b}_{A_2} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_{S_{2,2}} \\ \mathbf{b}_{S_{2,1}} \\ \mathbf{b}_{A_1} \end{bmatrix}, \quad (3.4)$$

$$\mathbf{A}_1 = [\mathbf{S}_1], \mathbf{x}_{A_1} = [\mathbf{x}_{S_1}], \mathbf{b}_{A_1} = [\mathbf{b}_{S_1}]. \quad (3.5)$$

である。このとき、 $\mathbf{A}_0$ に対する $\mathbf{A}_3$ のシュアー補行列は以下の式で表せる。

$$\mathbf{A}_0/\mathbf{A}_3 := \sum_{i=1}^8 \mathcal{L}_i \mathcal{D}_i^{-1} \mathbf{U}_i. \quad (3.6)$$

このシュアー補行列を用いることによって、式(3.1)に示す線形方程式を $\mathbf{A}_0$ から $\mathbf{A}_3$ のサイズまで縮小することができる。

$$\mathbf{A}'_3 \mathbf{x}_{A_3} = \mathbf{b}'_{A_3}, \quad (3.7)$$

$$\mathbf{A}'_3 = \mathbf{A}_3 - \sum_{i=1}^8 \mathcal{L}_i \mathcal{D}_i^{-1} \mathbf{U}_i, \quad \mathbf{b}'_{A_3} = \mathbf{b}_{A_3} - \sum_{i=1}^8 \mathcal{L}_i \mathcal{D}_i^{-1} \mathbf{b}_{D_i}. \quad (3.8)$$

また、レベル 2 とレベル 1 の分割面においても同じ方法で係数行列の縮小を行うことができる。

$$\mathbf{A}''_2 \mathbf{x}_{A_2} = \mathbf{b}''_{A_2}, \quad (3.9)$$

$$\mathbf{A}''_2 = \mathbf{A}'_2 - \sum_{i=1}^4 \mathcal{L}'_{3,i} \mathbf{S}'_{3,i}{}^{-1} \mathbf{U}'_{3,i}, \quad \mathbf{b}''_{A_2} = \mathbf{b}'_{A_2} - \sum_{i=1}^4 \mathcal{L}'_{3,i} \mathbf{S}'_{3,i}{}^{-1} \mathbf{b}'_{S_{3,i}} \quad (3.10)$$

$$\mathbf{A}''_1 \mathbf{x}_{A_1} = \mathbf{b}''_{A_1}, \quad (3.11)$$

$$\mathbf{A}''_1 = \mathbf{A}'_1 - \sum_{i=1}^2 \mathcal{L}'_{2,i} \mathbf{S}'_{2,i}{}^{-1} \mathbf{U}'_{2,i}, \quad \mathbf{b}''_{A_1} = \mathbf{b}'_{A_1} - \sum_{i=1}^2 \mathcal{L}'_{2,i} \mathbf{S}'_{2,i}{}^{-1} \mathbf{b}'_{S_{2,i}}, \quad (3.12)$$

上記の縮小プロセスにおいて、必要とされる逆行列の計算は小規模な行列 $\mathbf{D}_i^{-1}$ と $\mathbf{S}'_{i,j}{}^{-1}$ に関するのみとなるので、直接法で簡単に行うことができる。このとき、未知ベクトル $\mathbf{x}_0$ の一部である $\mathbf{x}_{A_1}$ が求まる。

求まった未知ベクトルの部分を上のレベルに代入し、以下の線形方程式を解くことによって、全体の未知ベクトル $\mathbf{x}_0$ が求まる。

$$\begin{aligned} \mathbf{S}''_{2,2} \mathbf{x}_{S_{2,2}} &= \mathbf{b}''_{S_{2,2}} - \mathbf{U}''_{2,2} \mathbf{x}_{A_1}, \\ \mathbf{S}''_{2,1} \mathbf{x}_{S_{2,1}} &= \mathbf{b}''_{S_{2,1}} - \mathbf{U}''_{2,1} \mathbf{x}_{A_1}, \\ \mathbf{S}'_{3,4} \mathbf{x}_{S_{3,4}} &= \mathbf{b}'_{S_{3,4}} - \mathbf{U}'_{3,4} \mathbf{x}_{A_2}, \\ \mathbf{S}'_{3,3} \mathbf{x}_{S_{3,3}} &= \mathbf{b}'_{S_{3,3}} - \mathbf{U}'_{3,3} \mathbf{x}_{A_2}, \\ &\vdots \\ \mathbf{D}_1 \mathbf{x}_{D_1} &= \mathbf{b}_{D_1} - \mathbf{U}_1 \mathbf{x}_{A_3}, \\ \mathbf{D}_2 \mathbf{x}_{D_2} &= \mathbf{b}_{D_2} - \mathbf{U}_2 \mathbf{x}_{A_3}, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (3.13)$$

これらの線形方程式も分割されたサブ領域と分割面に関するものであるため、直接法で容易に解くことができる。

### 3.2 高速逆 Laplace 変換の最適化

高速逆 Laplace 変換法(Fast Inverse Laplace Transform: FILT)では, Euler 変換の適用によって, 収束が早められたが, 打ち切り項数 $k$ と Euler 変換の項数 $p$ を大きく設定しなければいけない場合は全体の計算コストが高くなる. 強い電磁共鳴が発生する共振器構造やプラズモニクデバイスなどの設計では, 電磁界が安定するまでにより長い時間発展を計算する必要があるのである. この際に, 従来の FILT の理論式では数値が収束するまで計算すべき特異点が時間発展とともに増加し, 計算コストが膨大になる.

本節では最適化した FILT アルゴリズムを提案し, 長い時間発展が必要とされる解析を行う際の収束性を向上する. 最適化したアルゴリズムでは計算コストが時間発展とともに増加せず, 一定となる特徴がある. 次式に最適化した FILT アルゴリズムの理論式を示す.

$$f_{ec}(t, \alpha) = \frac{e^\alpha}{t} \left( \sum_{n=k_1}^{k_2} F_n + \frac{1}{A_{p0}} \sum_{n_e=1}^p A_{pn_e} F_{k_2+n_e} + \frac{1}{A_{q0}} \sum_{n_e=1}^q A_{q(q-n_e)} F_{k_1-n_e} \right), \quad (3.14)$$

ここで, 初項における $k_1$ と $k_2$ は複素平面で処理する特異点の範囲を限定する打ち切り項数である. この式において, 第二項と第三項はそれぞれ $k_2$ 側(プラス方向)と $k_1$ 側(マイナス方向)に Euler 変換を適用するために追加され,  $p$ と $q$ は項数を表す. 複数回 Euler 変換を適用することで数値の収束を加速することができ, 処理が必要な項数を $k_2 - k_1$ まで減らせる.

また, 式(3.14)で時間応答を求める際に処理すべき特異点のイメージを図3.3に示す. 従来の FILT では $n = 1 \sim (k + p)$ の特異点について計算する必要があったが, 最適化した FILT のアルゴリズムを用いることによって,  $(k_1 - q) \sim (k_2 + p)$ まで削減ことができる.

次に金属球による電磁界の散乱解析を行うことで提案手法の有効性を検証する. 図3.4に式(2.33)で時間応答解析を行った場合の,  $k + p$ に対する電界の収束特性を示す. 今回の解析では $t = 40$  fsから $200$  fsの観測時間における収束特性について検証を行った. ここで, 誤差パラメータは $\alpha = 6$ と設定した. 時間発展とともに, 6桁の計算精度を得るにはより多くの打ち切り項数が必要となり,  $k + p$ が増加していくことが明らかである.  $t = 200$  fsのとき, 約350個程度の項数が必要である.

次に, 最適化した FILT の性能を評価するために, 式(3.14)により同様の収束について確認した. 式(3.14)を用いる際, プラス方向とマイナス方向の打ち切り項数 $k_1 (> 1)$ と $k_2$ は以下の式で計算する.

$$k_1 = k_c - n, \quad k_2 = k_c + n, \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (3.15)$$

$$k_c = \text{int}(2f_c t), \quad (3.16)$$

ここで,  $f_c$ は入射波の中心周波数を表す.

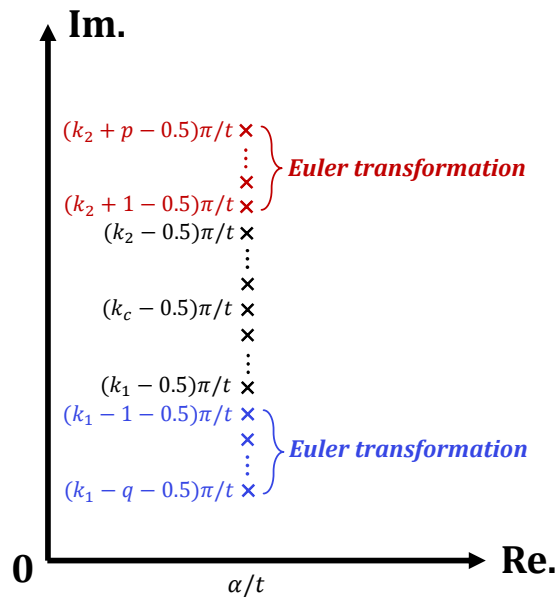


図3.3 複素平面における特異点の分布

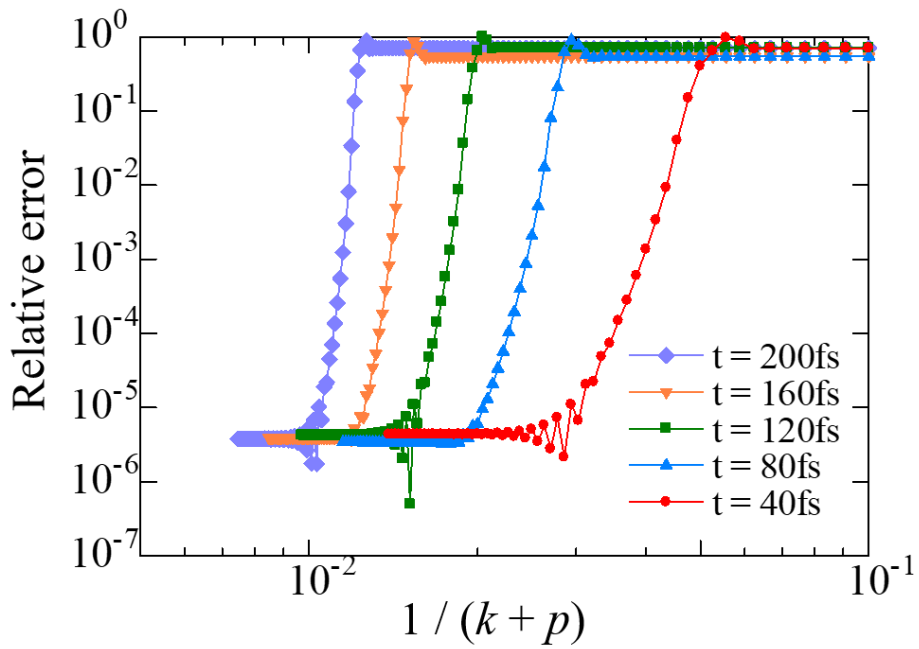


図 3.4 観測時間 $t$ を変換させた場合の級数 $k + p$ に対する電界 $E_x$ の収束特性

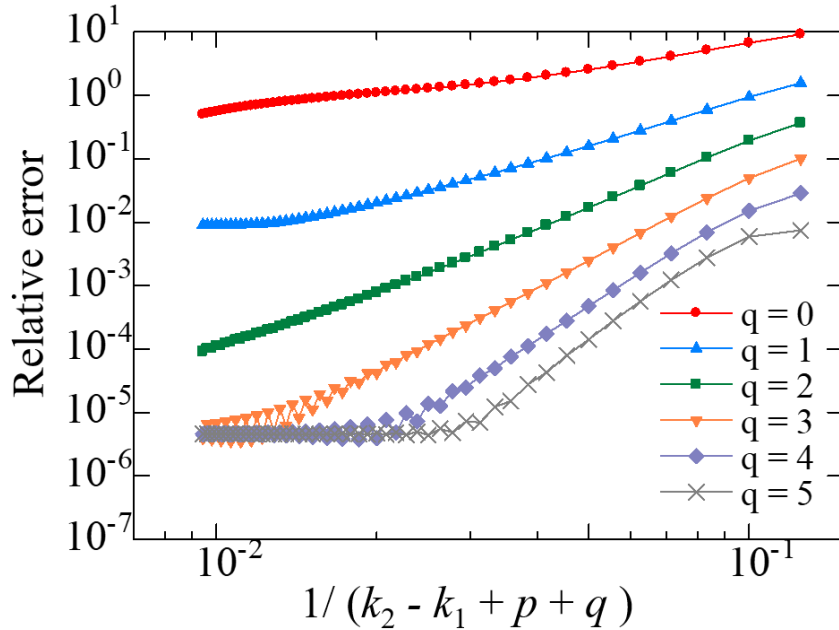


図 3.5  $q$  を変換させたときの最適化した FILT における数値の収束特性

図 3.5 に観測時間  $t = 200$  fs での収束特性を示しており、 $k_1$  側の Euler 変換項数  $q$  を 0 から 5 変化させた。ここで、横軸は処理する特異点の数であり、 $k_2 - k_1 + p + q$  で定義する。また、誤差パラメータは  $\alpha = 6$  と設定し、 $k_2$  側の Euler 変換項数  $p$  は 5 に固定した。図 5 より、同時に  $k_1$  と  $k_2$  側に Euler 変更を適用する際、収束が加速されることが明らかで、 $k_2 - k_1 = 60$ 、 $p = q = 5$  で相対誤差が  $10^{-6}$  程度まで収束した。

### 3.3 並列計算及び負荷分散

本節では並列計算と負荷分散による FDCFD-FILT の高速化を検討する。従来の時間領域の解法では、解析領域を空間的に分割し、各計算ノードに分配する[66]。このような並列計算を行う場合、各分割領域の境界面における電磁界情報を他領域に逐次伝送する必要はあるため、データ通信がボトルネックとなり並列化効率が低下する。

FDCFD-FILT では、式(3.14)における複素平面上の特異点  $s$  に対応する  $F_n(s, n)$  は独立な計算によって求められるため、 $f_{ec}(t, \alpha)$  の計算は複素周波数領域(Complex-Frequency-Domain: CFD)と時間領域(Time-Domain: TD)で分割して並列に処理することが可能である。FILT の並列計算では、ノード間の通信が発生しないため、適切に計算負荷を分散する場合、ほぼ 100% の並列化効率が得られる。

図 3.6 は CFD で計算負荷を分割する際のフローチャートを示す。総和計算を行うため、複素平面上の特異点  $s$  に対応する各項を並列に処理する。TD での負荷分散も可能であり、実行する際のフローチャートを図 3.7 に示す。FILT は各観測時間における時間応答を計算するために使用されるため、異なる観測時間での処理はそれぞれの計算ノードに分配される。また、2 種類の分割方法を同時に適用する TD-CFD 分割も可能であり、図 3.8 にフローチャ

ートを示す. この場合, 各観測時間と. 本稿では電磁界の全ベクトル時間応答解析を行う際の並列化効率に基づき, 負荷分散の最適化を検討する. ここで, 複素平面で処理する特異点は式(3.14)の $k_1$ から $k_2$ とした.

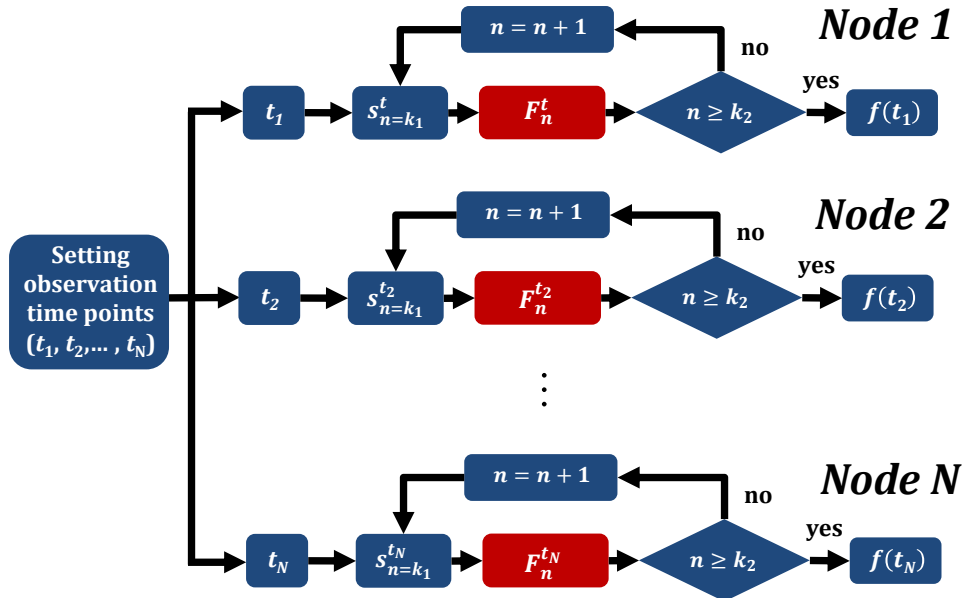


図 3.6 FILT における計算負荷の時間領域分割フローチャート

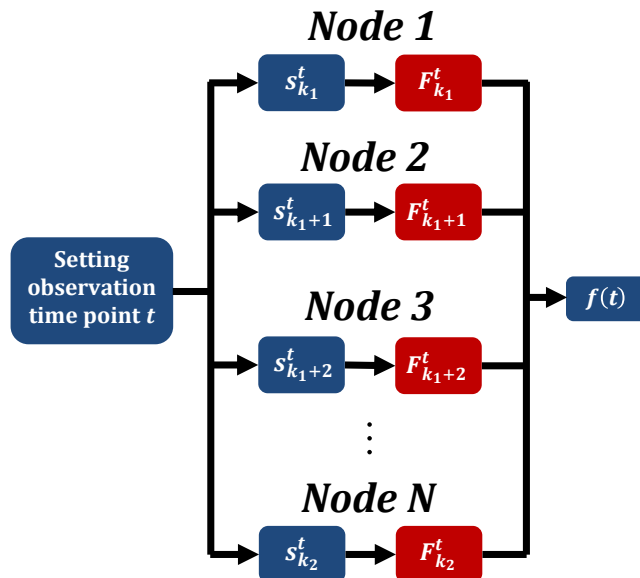


図 3.7 FILT における計算負荷の複素周波数領域分割フローチャート

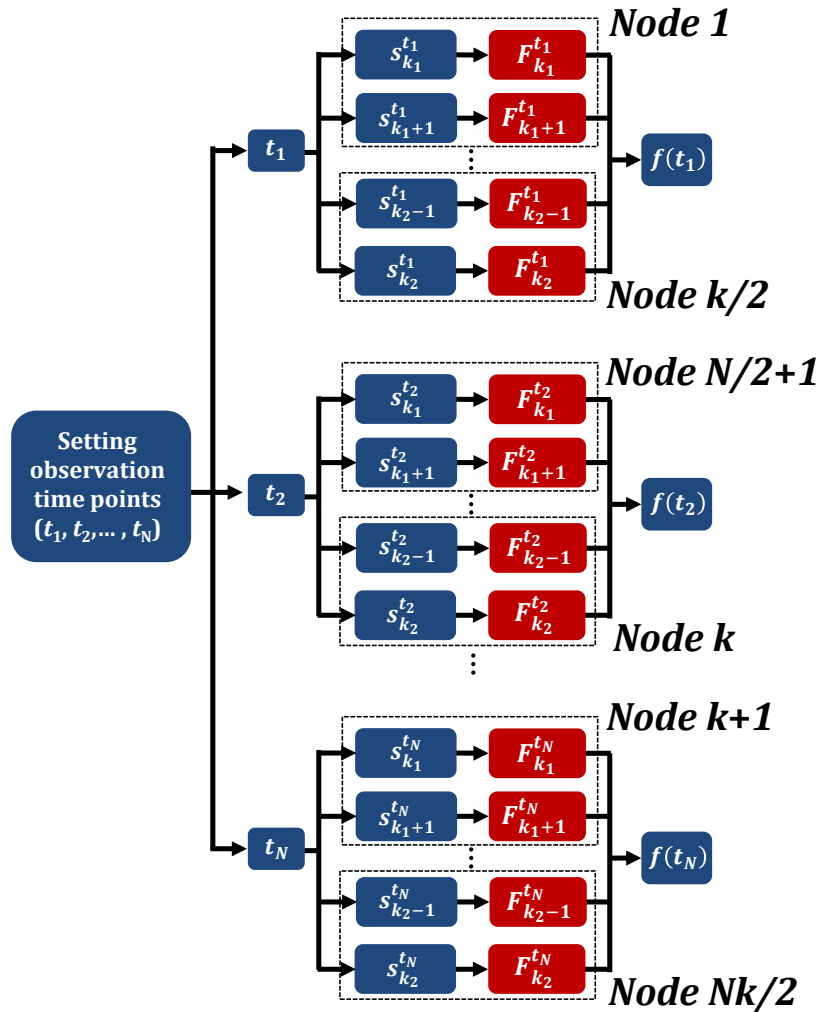
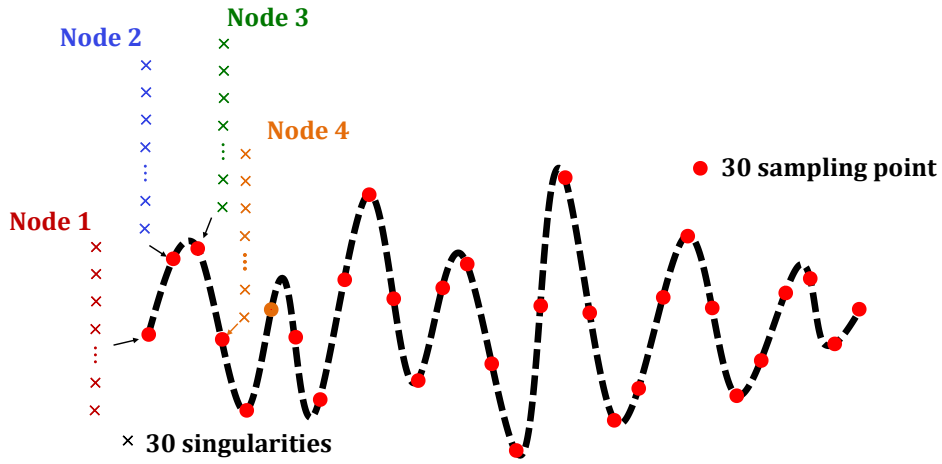


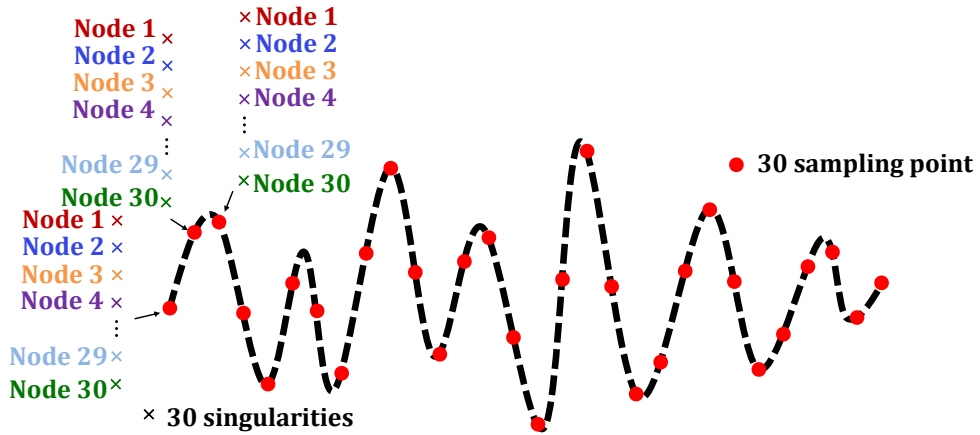
図 3.8 FILT における計算負荷の時間-複素周波数領域分割フローチャート

並列化効率を調査するために、3.2 章と同じ微小金属球の表面における電磁界分布の時間応答をシミュレーションした。ここで、観測時間  $t = 200\text{--}203\text{ fs}$  とした。提案手法は解析対象のサイズに関係なく、長い時間発展が必要とされる解析に効果的である。時間応答の計算において処理が必要とされる複素平面における特異点の数は式(3.15)と式(3.16)によって決め、時間応答のサンプリング間隔  $\Delta t$  は入射波の約 0.1 周期である 0.1 fs と設定した。図 3.9 に示すように、この場合、今回の解析では時間軸上のサンプリング数が 30 となり、1 つのサンプリングを計算するために処理すべき複素平面上の特異点数は 30 となった。また、計算負荷は CFD と TD で分割され、各計算ノードに均等に分散した。

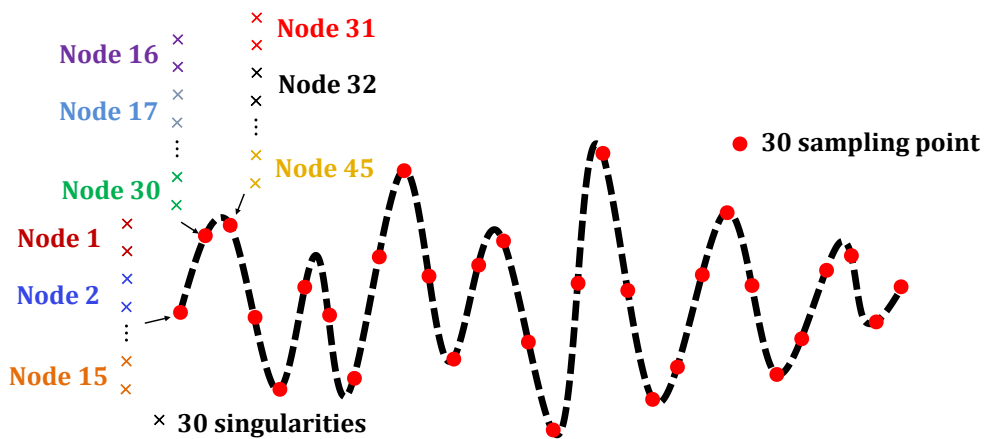




(a) 時間領域分割



(b) 複素周波数領域分割



(c) 時間-複素周波数領域分割

図 3.9 時間応答波形を計算する際の負荷分散

表 3.1 は計算ノードを変化させたときの計算時間を示す。この条件では CFD 分割か TD 分割で計算負荷を 30 計算ノードに分散する際、いずれも計算時間を約 1/30 まで低減できる。しかし、CFD 分割と TD 分割の片方のみを使う場合、これ以上に計算コストを分散できないため、さらに計算時間を減らすことができない。計算コストをより効率よく分散させるために、二種の負荷分散法を同時に適用することが理想的である。表 3.1 の最後 8 行目に示すのは 2 種の分割法を使用して 100 の計算ノードに計算負荷を分散した際の計算時間である。この場合、全計算コストはまず TD で 10 部分に分割される。すべての部分に時間応答サンプリング点が 3 つ含まれる。また、1 サンプリング点の時間応答を求めるには複素平面上的特異点を 30 個計算しなければならない。即ち、3 つの時間軸上サンプリング点に対応する特異点は 90 個である。90 個の特異点に関する計算はさらに 10 計算ノードに均等に分散することができ、1 計算ノード当たりには特異点 9 個の計算負荷が分配される。したがって、CFD 分割と TD 分割を同時に使用することによって全計算負荷は 100 計算ノードに均等に分散することができ、このとき計算時間は約 1/100 まで低減する。提案手法で並列計算を行う場合、理想的な speed-up は以下の式で評価できる。

$$\text{Speed-up} = N_s \times N_t, \quad (3.23)$$

ここで、 $N_s$  と  $N_t$  はそれぞれ CFD と TD での分割数である。今回の解析では  $N_s = N_t = 30$  であるため、使用する計算ノード数が 900 までにはほぼ 100% の並列化効率を保つことができ、計算時間が線形的に短縮される。

表3.1 計算ノード数と負荷分散方式を変化させたときの計算時間

TD 分割数	CFD 分割数	計算時間 [a.u.]
1	1	1.0000
1	10	0.1029
1	30	0.0341
1	100	0.0340
10	1	0.1021
30	1	0.0327
100	1	0.0333
10	10	0.0111
15	30	0.0025
30	30	0.0013

## 第4章 プラズモニックデバイス設計への応用

### 4.1 光直接磁気記録用アパーチャー型アンテナ

近年, IoT 機器などで利用される高集積デバイスの要素技術である光励起・偏光制御・光分岐・集光素子の小型化が注目を集めている. 特に微小金属構造体における表面プラズモンを利用するプラズモニックデバイスは, ナノスケールの小型化を実現できる新技術として期待されている[1-3]. 近年注目される高密度光直接磁気記録はプラズモニックデバイスを利用した応用例の一つである[27,28]. この記録方式では, 記録密度向上のため図 4.1 に示すアパーチャー型の金属ナノアンテナを用いる. このアンテナは外部からの光照射により金属表面にプラズモンを励起させ, 高密度記録のために局所的な円偏光を生成する. 本デバイスの設計には電磁界の高精度解析が重要であり, 偏光制御や局所光強度の観点から記録安定性を評価する.

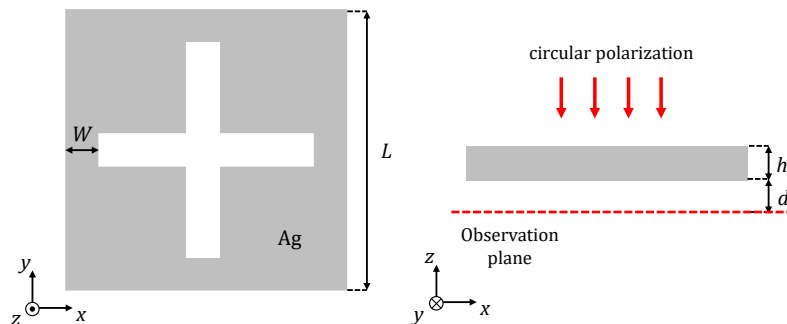


図 4.1 光直接記録用アパーチャー型アンテナ

図 4.1 にアパーチャー型アンテナの解析モデルを示す. 長さ  $L = 100 \text{ nm}$ , 厚み  $h = 10 \text{ nm}$  の銀の平板に幅  $W = 10 \text{ nm}$  の十字型アパーチャーが開いている.  $-z$  方向に一樣な円偏光平面波が入射する. また, 入射波は波長  $\lambda = 780 \text{ nm}$  とした. この際に, 外部からの入射光によりアンテナ表面にプラズモンが励振され, アパーチャーの開口部中心にのみ強い円偏光が生成される. アンテナ下部の電磁界の状態を調査するために, 表面から  $10 \text{ nm}$  離れた観測面を設けた.

また, 円偏光の生成を確認するために, 以下に示す式により観測面における電界の強度  $I$  と円偏光度  $C$  を調査した.

$$I = \langle E_x \rangle^2 + \langle E_y \rangle^2 + \langle E_z \rangle^2, \quad (4.1)$$

$$C = \frac{2\langle E_x \rangle \langle E_y \rangle \sin(\delta_a)}{\langle E_x \rangle^2 + \langle E_y \rangle^2 + \langle E_z \rangle^2}. \quad (4.2)$$

ここで、 $\langle E_x \rangle$ 、 $\langle E_y \rangle$ 、 $\langle E_z \rangle$ は電界応答の時間平均であり、 $\delta_a$ は $x, y$ 成分電界の位相差を表す。円偏光が生成されるとき、円偏光度 $C$ は1か-1になる。また、性能指数 $F = |I \times C|$ を定義し、アンテナが局所的に円偏光を生成する能力を評価する。

図 4.2 に観測面における電界強度  $I$ 、円偏光度  $C$  及び性能指数  $F$  を示す。アンテナの開口部中心のみに強い電界強度と約-1 の円偏光度が得られており、高い性能指数を示した。これは光直接磁気記録に必要な局所的な円偏光の生成を意味する。

図 4.3 に開口部中心での電界の状態を示す。外部から光が入射された後、開口部中心における電界が増幅されながら、軌跡が徐々に円に近づく。約 50fs 後に、電界が安定になり、明らかに円偏光の特性を示した。

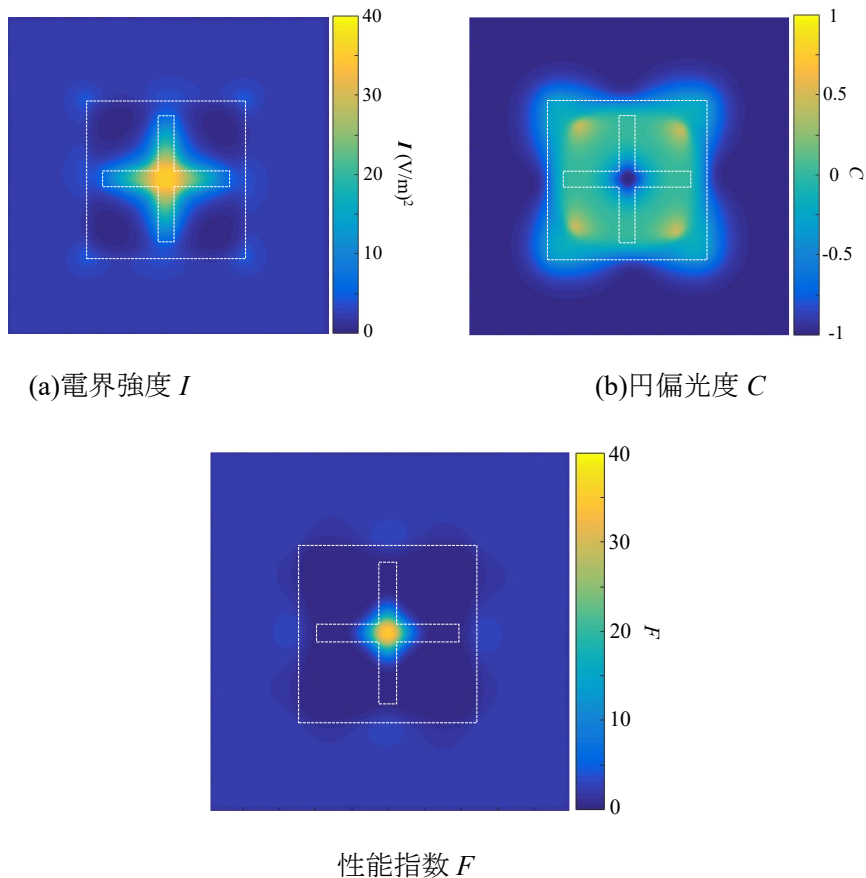
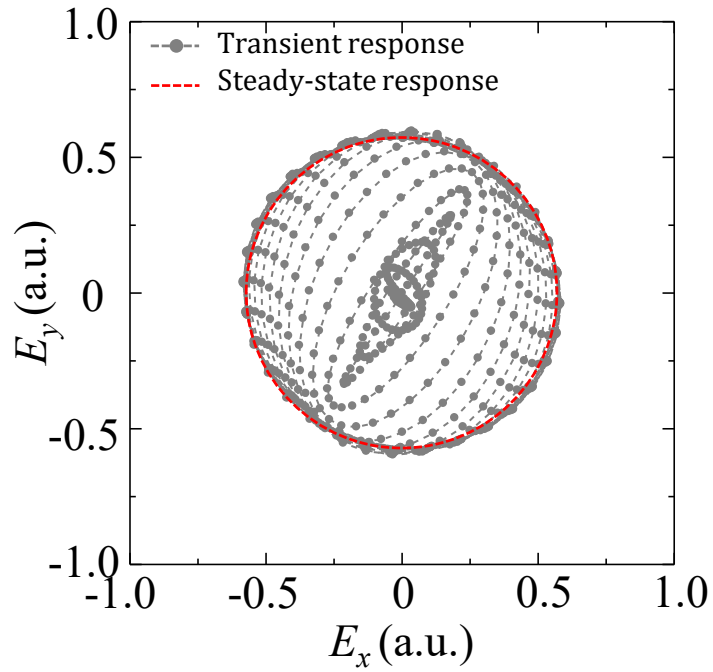
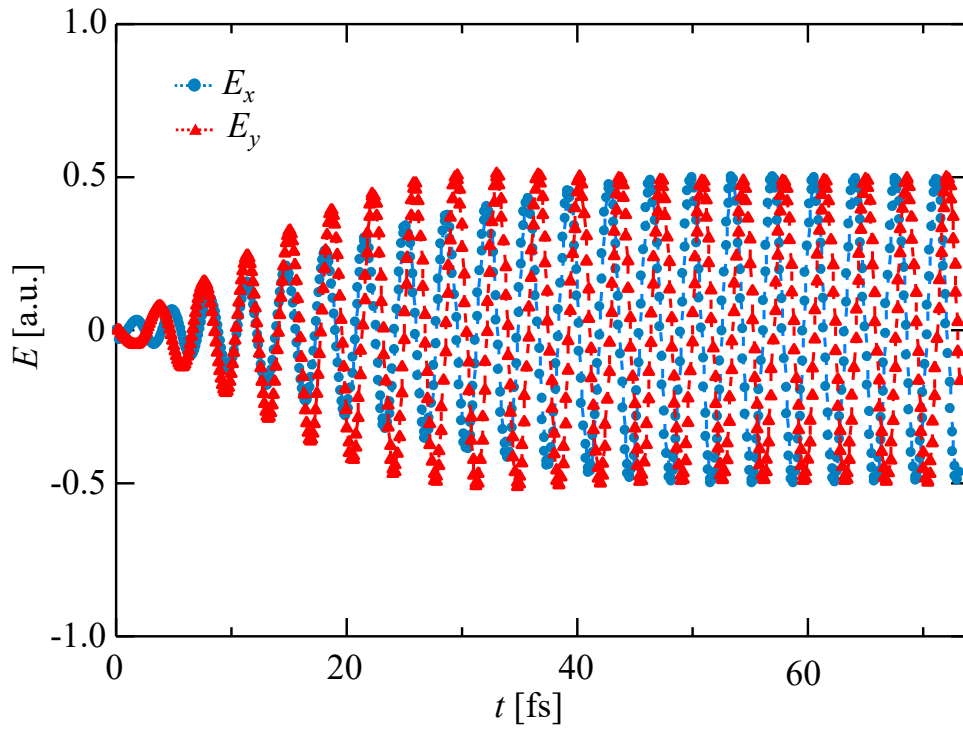


図 4.2 観測面における電界強度  $I$ 、円偏光度  $C$  及び性能指数  $F$



a) 電界リサージュ図



b) 電界時間応答

図 4.3 アンテナ開口部中心における電界の状態

## 4.2 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

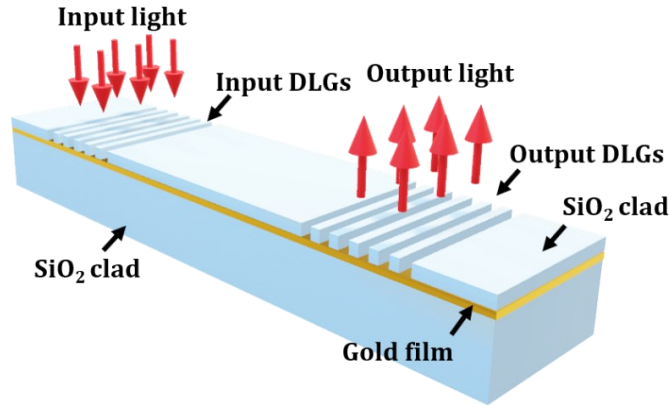


図 4.4 誘電体装荷グレーティングを用いたプラズモニック導波路

誘電体装荷グレーティング(Dielectric Loaded Gratings: DLGs)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えるデバイスとして提案されている[29]. 構造が単純なため、製造は比較的容易である. 図 4.4 に DLGs を用いたプラズモニック導波路のモデルを示す. シリカクラッドの上に薄い金薄膜を設置し、さらにその上にシリカの入出力用の DLGs や導波路クラッドを装着する構造である. 入力 DLGs に Gaussian ビームを入射すると、入射光は DLGs と結合することにより表面プラズモンを励振し、導波路に沿って伝搬される. また、励振された表面プラズモンが出力 DLGs に到達すると、出力光として放射される.

従来の時間領域解析法で DLGs による出力光の放射を解析する場合、ビーム入射の初期状態から電磁界の逐次計算を行うが、FDCFD-FILT では、表面プラズモンが出力 DLGs に到達した時点など、任意時刻での解析が可能となるため、より効率的に特性を検証できる.

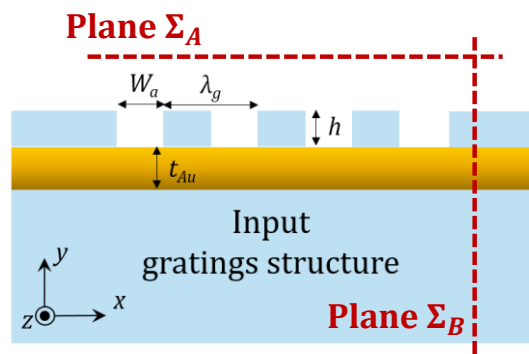


図 4.5 誘電体装荷グレーティング構造

図 4.5 は DLGs 構造の拡大図であり、 $z$  方向には一様な断面を有するモデルを想定した. ここで、 $\lambda_g$  は DLGs 周期、 $t_{Au}$  は金薄膜の厚み、 $W_a$  は空気層の幅を示す. DLGs 及び金属薄

膜上部クラッドの高さ $h$ は入射光の半波長に固定し、DLGsの長さは $10\mu\text{m}$ とした。また、入射光として波長 $1.55\mu\text{m}$ のGaussianビームを仮定する。入力DLGsの反射率 $R$ 及び結合率 $C_g$ を評価するために、DLGsから $+y$ 方向に $3\mu\text{m}$ 離れた観測面 $A$  ( $\Sigma_A$ )及び $+x$ 方向に $1\mu\text{m}$ 離れた観測面 $B$  ( $\Sigma_B$ )を通過するエネルギー比を次式により計算する。

$$R = \frac{\int_{\Sigma_A} (E_x^s)^2 \cdot \Delta x}{\int_{\Sigma_A} (E_x^i)^2 \cdot \Delta x}, \quad (4.3 - a)$$

$$C_g = \frac{\int_{\Sigma_B} (E_y^{\text{tot}})^2 \cdot \Delta y}{\int_{\Sigma_A} (E_x^i)^2 \cdot \Delta x}, \quad (4.3 - b)$$

ここで、 $E_y^{\text{tot}} = E_y^s + E_y^i$ 。

まず、入力DLGsによる表面プラズモンの励振及び伝搬効率を評価する。図4.6にDLGs周期 $\lambda_g$ 及び空気層 $W_a$ を変化させた際の、a) 観測面 $A$ で計算した反射率 $R$ 、b) 入射光と入力DLGsとの結合率 $C_g$ を示す。ここで、金薄膜の厚みは $20\text{nm}$ と固定した。DLGsの反射率は $0.30$ で最小となり、このときの結合率は $0.15$ となる。

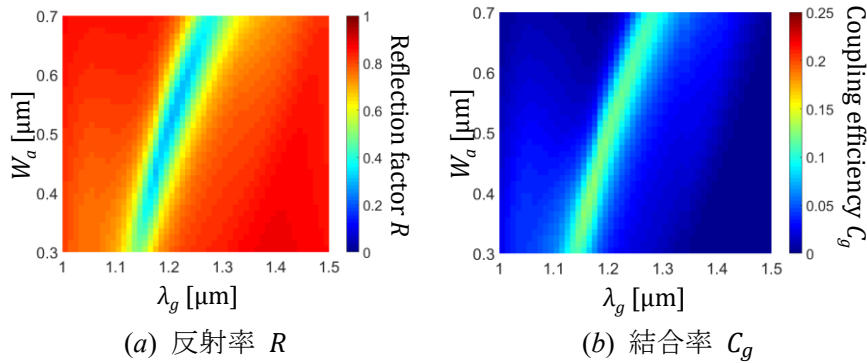


図 4.6 グレーティング周期 $\lambda_g$ 及び空気層幅 $W_a$ の反射率 $R$ と結合率 $C_g$ 特性 ( $t_{Au} = 20\text{nm}$ )

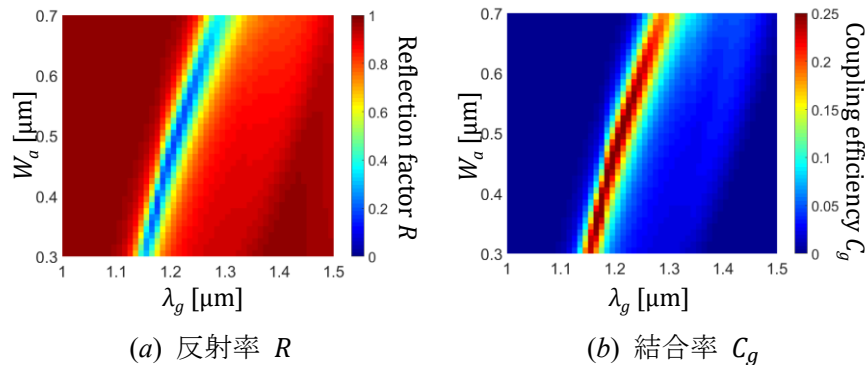


図 4.7 グレーティング周期 $\lambda_g$ 及び空気層幅 $W_a$ の反射率 $R$ と結合率 $C_g$ 特性 ( $t_{Au} = 100\text{nm}$ )

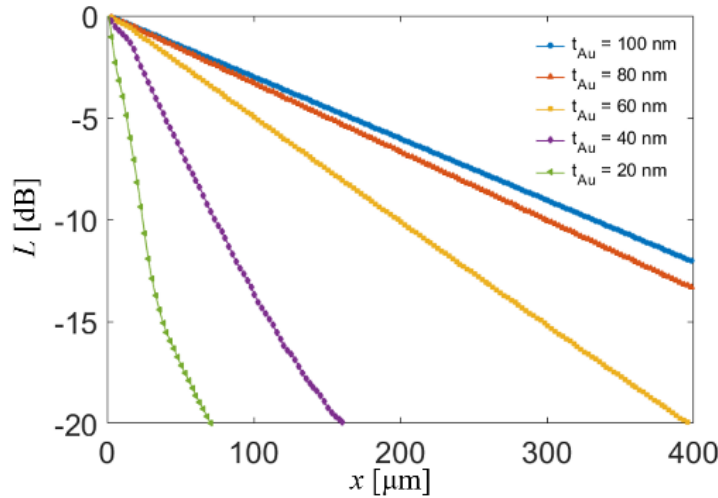


図 4.8 金薄膜厚み $t_{Au}$ を変化させた際のクラッド内に伝搬するエネルギーの伝搬損失 $L$

図 4.7 に金薄膜の厚み $t_{Au}$ を 100nm に変化した際の解析結果を示す．観測面 $A$ における反射率は， $\lambda_g = 1.20\text{nm}$ ， $W_a = 0.48\text{nm}$ で $R = 0.17$ と最小になる．このときの結合率は 0.26 となる．

図 4.8 に金薄膜の厚み $t_{Au}$ を 20 nm から 100 nm に変化させた際の，クラッド内を伝搬するエネルギーの伝搬損失 $L$ を示す．厚みに対する DLGs のパラメータは結合率が最大となるように設定した．伝搬距離 100  $\mu\text{m}$  に対するエネルギーの伝搬損失は， $t_{Au} = 100\text{ nm}$ の場合 -2.5dB 程度となることが確認できる．

図 4.9 に金薄膜の厚み $t_{Au} = 100\text{ nm}$ ，DLGs 周期 $\lambda_g = 1.20\text{ nm}$ ，空気層 $W_a = 0.48\text{ nm}$ の際の DLGs 近傍における電界分布を示す．金薄膜表面のみに電界が強く集中しながら， $+x$ 方向への伝搬が確認できる．

次に，出力 DLGs を設置した場合の解析結果を示す．入力側に 50  $\mu\text{m}$  離れた点から，長さ 10 $\mu\text{m}$  の出力 DLGs を設置した．図 4.10 に伝搬された表面プラズモンが出力 DLGs に到達した時点における電界の空間分布を示す．出力 DLGs により，クラッド内に閉じ込められた光が導波路上方に放出されることを確認できる．

図 4.11 は金薄膜表面から $x$ 軸に対して平行に2~3  $\mu\text{m}$ 離れた面での電界強度分布である．ここで，-10  $\mu\text{m}$ から0  $\mu\text{m}$ に出力 DLGs，50  $\mu\text{m}$ から60  $\mu\text{m}$ に出力 DLGs を設置した．入出力 DLGs が設置せられた部分でのみ電界は強くなる．特に出力部から放射される電界強度は約 0.5 V/m に対し，クラッド部の電界強度は 0.05 V/m 以下となる．また，次式により定義するエネルギーの入出力比 $O$ は 12.8%であることを確認した．

$$O = \frac{\int_{\Sigma_C} (E_x^{tot})^2 \cdot \Delta x}{\int_{\Sigma_A} (E_x^i)^2 \cdot \Delta x}, \quad (4.4)$$

ここで， $\Sigma_C$ は出力 DLGs から $+y$ 方向に3 $\mu\text{m}$ 離れた観測面 $C$ である．



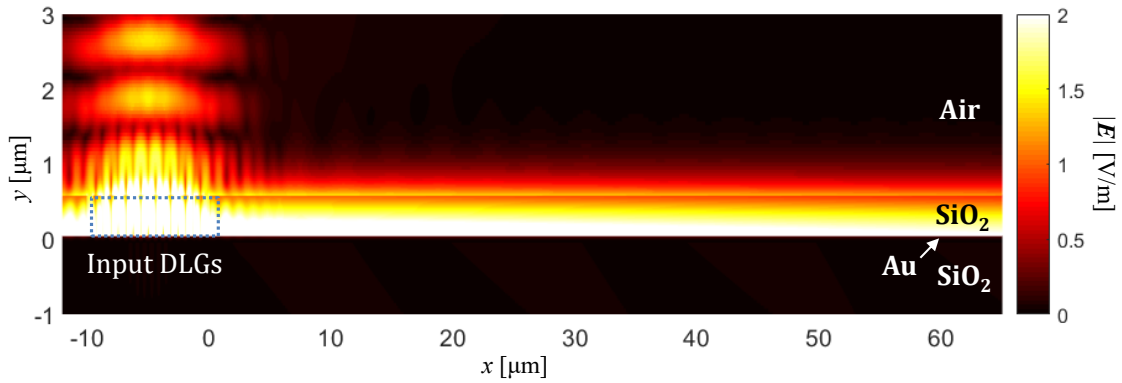


図 4.9 プラズモニック導波路近傍における電界強度分布

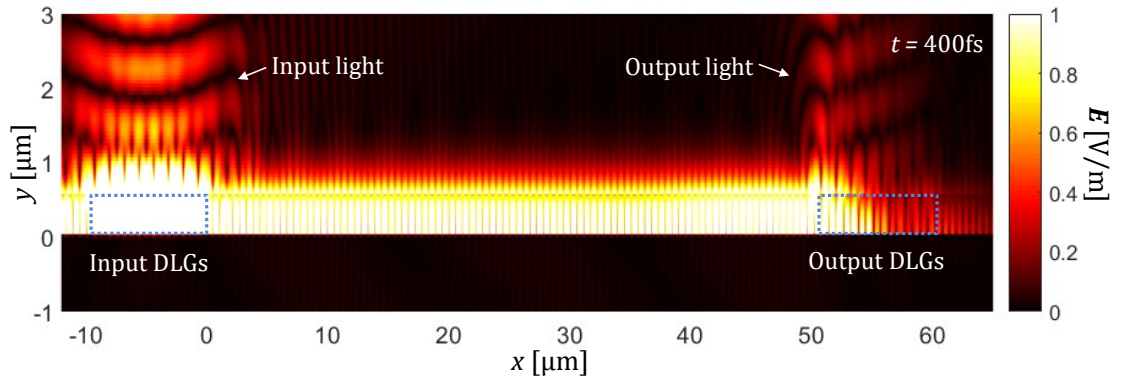


図 4.10 表面プラズモンが出力 DLGs に到達した際の電界分布

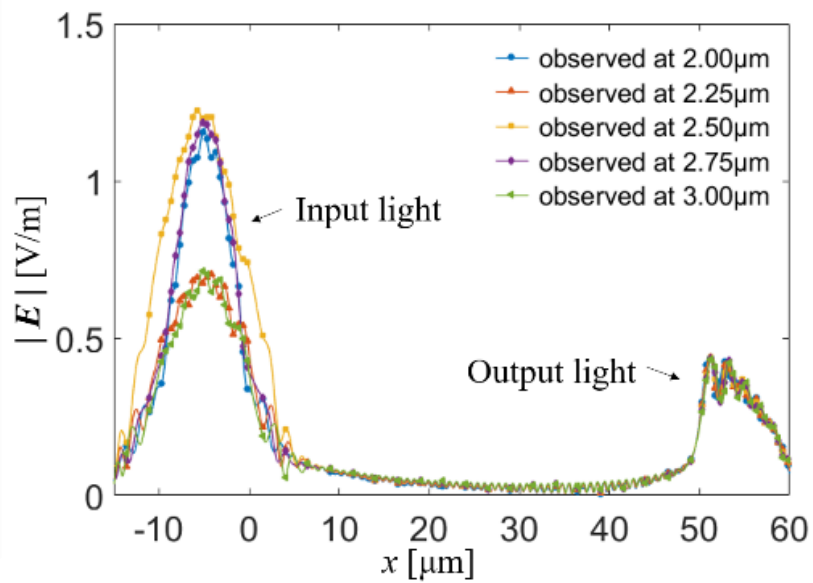


図 4.11 導波路上空における電界強度分布

## 4.3 量子ウォーク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

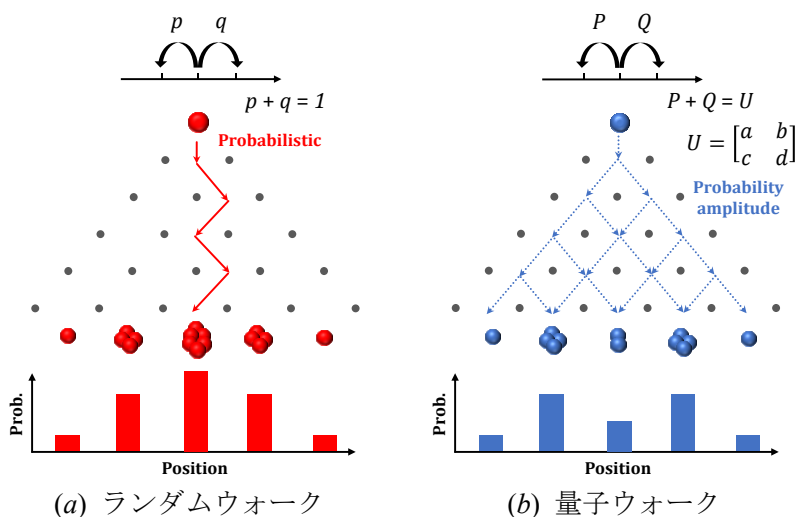
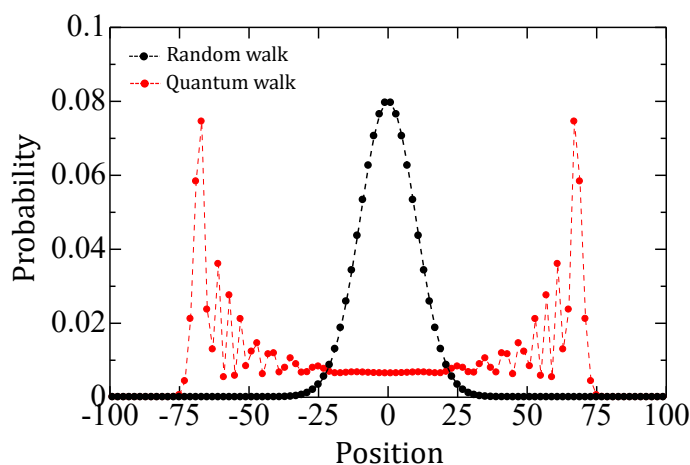


図 4.12 ランダムウォークと量子ウォークの概念

図 4.13  $t = 100$ におけるランダムウォークと量子ウォークの確率分布

量子ウォーク(Quantum walk)[30, 31, 67]は、コイン投げ結果に準じた経路選択過程である確率論的(古典的)ランダムウォークを量子力学支配体制下で拡張したものであり、量子力学やこれが支配的になる物理現象のより深い理解を得るために研究されてきた。近年、そのような基礎研究にとどまらず、量子ウォークは新たな量子計算アプローチとして注目を集めている。例えば、計算困難問題であるグラフ同型判定の効率的計算や量子アルゴリズム[68, 69]が提案されている。

光子が光回路中を「ウォーク(walk)」する、つまりフォトニック系による量子ウォークの実装が多数報告されている[70]。そのフォトニック量子ウォークにおいては、シリカやシリコンを母材とする光導波路プラットフォームによる光回路が主に採用され、現在、多次元化

や大規模化へ向けた取り組みも精力的に行われている。我々は、量子ウォークを実装するための光導波路プラットフォームとして、長距離伝搬型表面プラズモンポラリトン導波路(LR-SPP 導波路)[71, 72]に注目している。本導波路は、電磁場と金属表面の電子粗密波が結合し、かつそれが量子化された準粒子（表面プラズモンポラリトン, SPP）を伝搬し、単一偏光導波路としての使用が可能であるなど一般的な光導波路とは異なる性能を有する[72, 73]。また、3次元構造への展開（2次元量子ウォークの実装）も期待される。しかし、これまでに LR-SPP 導波路プラットフォームによるプラズモニック量子ウォークの実現可能性や有用性は理論（数値解析）と実験の両側面で明らかとなっていない。

本節では、LR-SPP 導波路アレイ中の電磁界解析を示し、その結果が連続量子ウォークの振舞いになっていることを示す。本研究では、電磁界解析に複素周波数領域有限差分法及び高速逆 Laplace 変換法のコンビネーションである FDCFD-FILT を用いることによって、効率的に電磁界強度分布の時間発展を得た。また、その電磁界強度分布の時間発展を実験的に求めた量子ウォーク時間発展と比較することで、FDCFD-FILT による数値解析が LR-SPP 導波路系の電磁界シミュレーションとして有用であることを示し、さらには、LR-SPP 導波路プラットフォームによる3次元構造へ向けた展望も議論する。

ウォーカーである粒子が確率的に動く古典的ランダムウォークに対して、量子ウォークでは、ウォーカーの振舞いは量子力学の基本原理解である「粒子と波動の二重性」に従う。言い換えれば、粒子の存在位置の確率振幅が干渉しながら時間発展し、ある位置で粒子が最終的に観測される確率は確率振幅の2乗で与えられる。図 4.12(a)にランダムウォークと(b)量子ウォークのイメージを示す。古典的ランダムウォークの場合、粒子は各試行において確率 $p$ 及び $q$ で左右に移動する。ここで、 $p + q = 1$ である。特に、 $p = q$ の対称系の場合、試行を複数回行った後の粒子の存在位置確率分布は二項分布となり、左右への移動する試行回数 $t$ が多くなると確率分布は Gaussian 分布に近づく。一方、量子ウォークの場合、粒子は確率振幅（波動関数）で記述され、各試行における時間発展は演算子( $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{Q}$ )で与えられる。

$$\mathbf{P} + \mathbf{Q} = \mathbf{U}. \quad (4.5)$$

ここで、 $\mathbf{U}$ はユニタリ行列であり、今回これを単純かつ広く扱われる Hadamard ゲート[2]とし、かつ対称系となることを前提にすると、

$$\mathbf{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}. \quad (4.6)$$

となる。試行ステップ  $t$  から  $t+1$  への時間発展は、

$$|\psi\rangle_{t+1}(x) = \mathbf{P}|\psi\rangle_t(x+1) + \mathbf{Q}|\psi\rangle_t(x-1) \quad (4.7)$$

となる。ここで、 $|\psi\rangle_t(x)$ は試行ステップ $t$ 、位置 $x$ における確率振幅を示す。この条件において試行ステップを $t = 100$ まで時間発展させたときの粒子存在位置確率分布を古典的ランダムウォーク( $p, q = 0.5$ )の場合と合わせて図 4.13 に示す。ランダムウォークでは、確率分布特性が Gaussian 分布となる。一方、量子ウォークの場合、確率振幅の干渉により時間発展後の粒子存在位置確率分布は二つの端点に局在する（弾道的時間発展）。このように、量

量子ウォークの時間発展はランダムウォークのそれとは完全に異なるものになる。同図に見る極めて高速な確率分布散逸や局在が数多く提案されている量子アルゴリズムの重要な基本概念となっている[68, 69].

上記の量子ウォークは各試行ステップが離散していることから離散量子ウォークと呼ばれる。一方、以下で扱う LR-SPP 導波路アレイ中で観測される量子ウォークは各試行ステップが分割できない連続型の量子ウォーク[30, 31]である。連続型においても離散型で見たような高速拡散や局在はもちろん観測されるものの、等しい振舞いとはならないことをここで注意しておく。

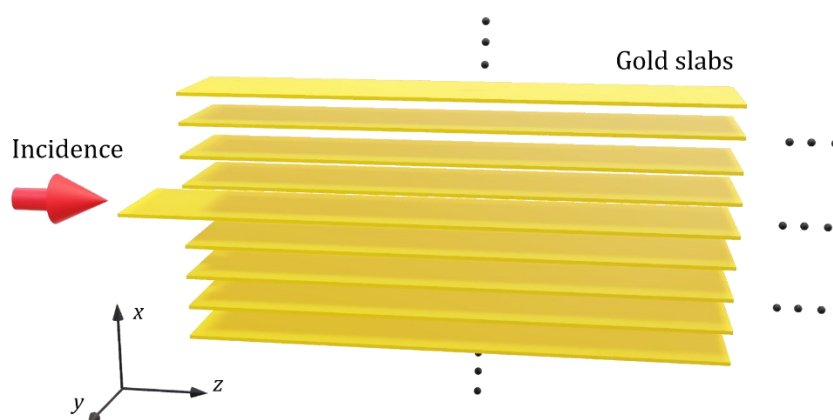


図 4.14 金属ストリップ型プラズモニック導波路アレイ

図 4.14 に示す金属ストリップ型プラズモニック導波路アレイ(Plasmonic Waveguide Array: PWA)は金属ナノ構造を持ち、ナノサイズの量子ウォークを実現する構造として期待されている。ここでは、光ファイバの端部よりストリップに光を入射する際の表面プラズモンの遷移及び、電界分布を解析する。本稿のモデルは $y$ 軸方向に一様で、 $x$ 軸方向の金属ストリップの厚みは 20 nm とする。

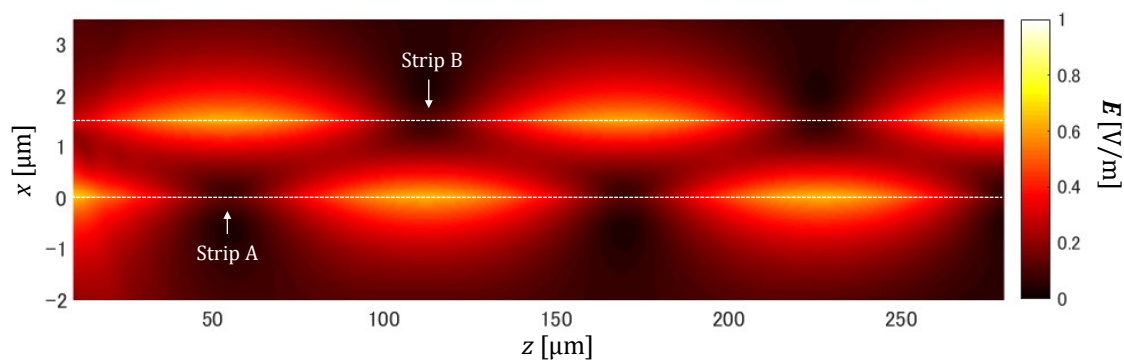


図 4.15 金属ストリップ近傍における電磁界分布

図 4.15 に間隔  $1.5 \mu\text{m}$  を持つ二枚のストリップ間における電界の強度分布を示す. 金属ストリップ A に直接光を入射し, 表面プラズモンを励振及び伝搬させる. 図より, プラズモンは 2 枚のストリップ間の遷移を繰り返しながら伝搬することが確認できる.

図 4.16 に 11 枚のストリップアレイにおける表面プラズモン遷移の時間応答を示す. 表面プラズモンが中心にあるストリップに励振させてから徐々に周り拡散していく過程が確認できた.

次に, ストリップの枚数をさらに増加し, 量子ウォークに応用を目的とした 31 枚のストリップに対して伝搬特性を検証する. 中心のストリップに光を入射し, その上下に各 15 枚のストリップを設置した際の PWA 近傍における電界分布を図 4.17 に示す. 中心のストリップに表面プラズモンが励振され, その後, 上下のストリップにプラズモンが遷移しながら伝搬する.

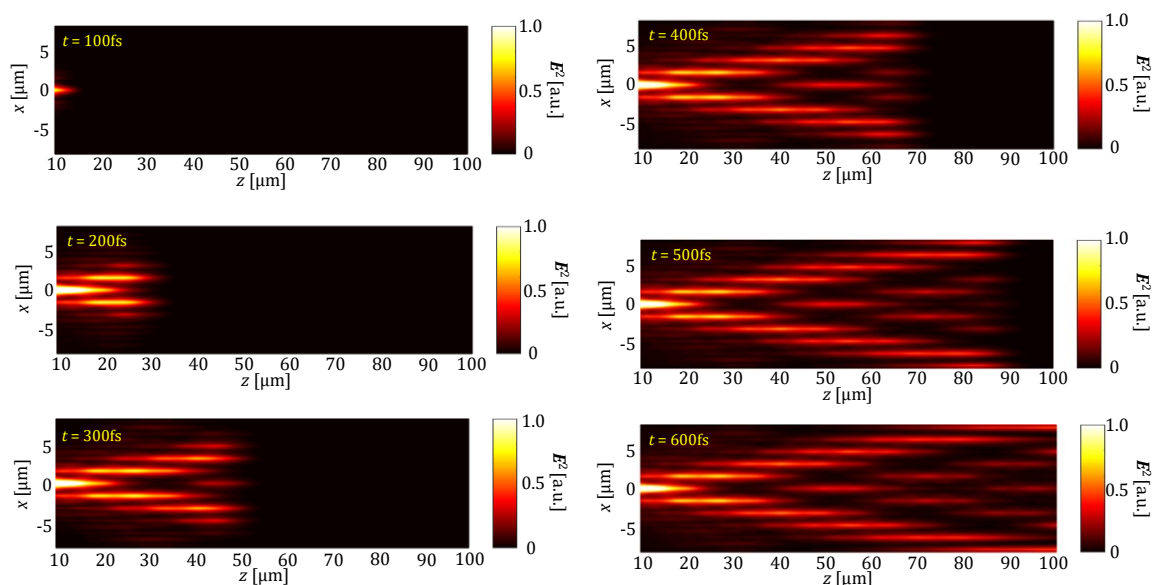


図 4.16 PWA における表面プラズモン遷移の時間応答

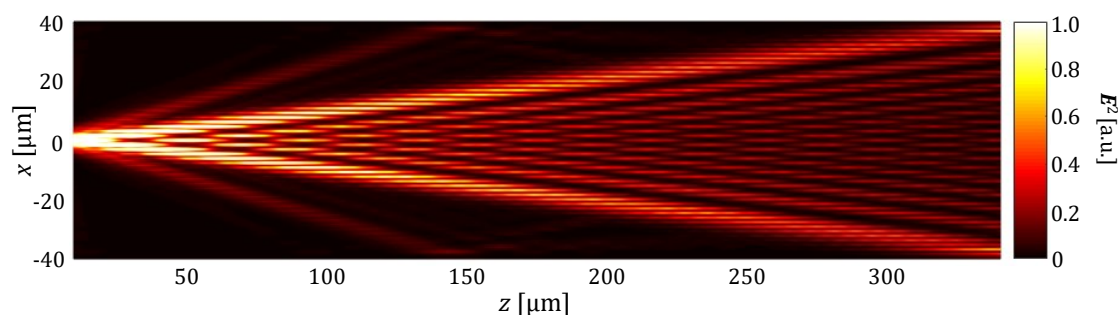


図 4.17 PWA における表面プラズモンの遷移

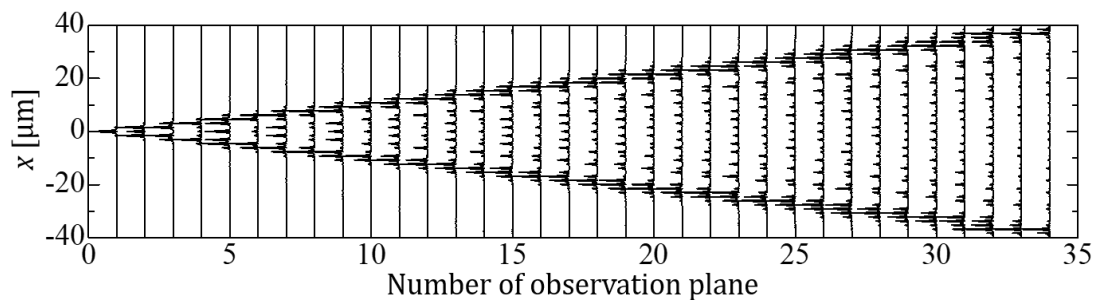


図 4.18 観測面における電界強度分布

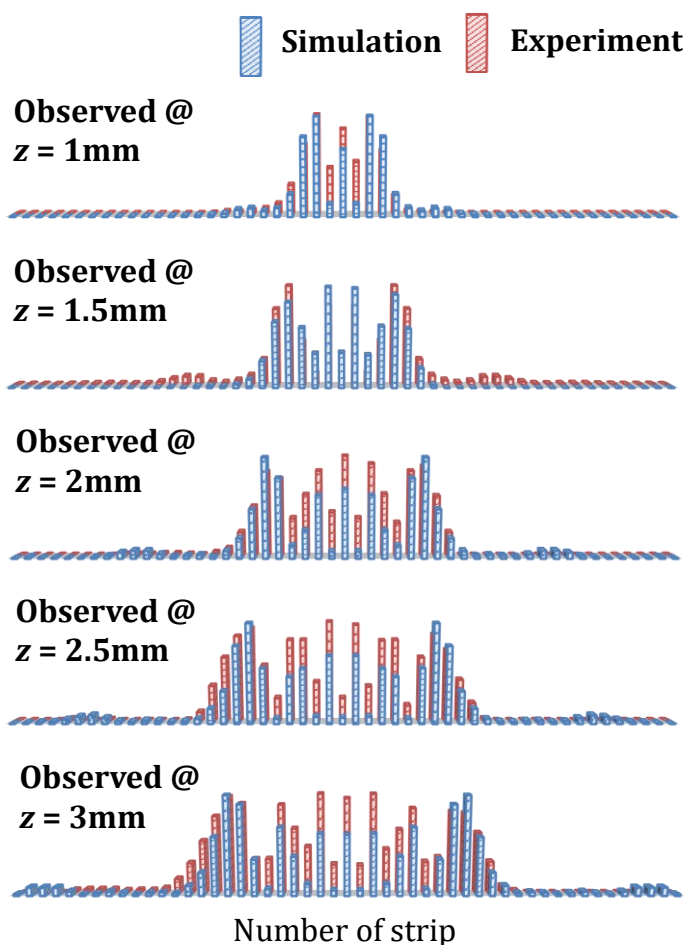


図 4.19 解析結果と観測値の比較

図 4.18 に各観測面における最大値で規格化した電界の強度分布を示す。表面プラズモンの強度が最大となる点は伝搬及び遷移するにつれて中央から PWA の両端に向かって線型的に広がり、入射位置から離れたストリップに電界が最も集中するような結果が得られた。電磁界解析で計算された電界強度は、単一光子が観測される確率分布に対応する。古典的なランダムウォークでは、入力を中心として Gaussian 分布的に粒子の出力が広がるのと異なり、量子ウォークでは光子が線型的に広がり、二つの端点に局在する[67]。今回の解析結果はこ

の量子ウォークの確率分布特性を明確に示しており、PWA を量子ウォークに応用する際の有用性が検証できる。

最後に解析結果と実験結果の比較を行う。実際に作成した LR-SPP 導波路アレイでは、作製難易度を考慮し、 $x$ 方向(Transverse 結合)ではなく、 $y$ 方向(Longitudinal 結合)に結合するように金ストリップを配置した。Longitudinal 結合と Transverse 結合とでは最近接導波路間の結合距離がもちろん異なる。解析結果と実験結果の適合より、それら結合距離の比は約 25 倍であった。図 4.19 に Longitudinal 結合系で実験的に得られた出力強度分布と、Transverse 結合系の数値解析結果を同時に示す。導波路長さ  $z = 1 - 3\text{mm}$  でそれぞれ得られた実験的強度分布(Longitudinal 結合系)は、それぞれに対応する伝播長さ  $z = 0.46 - 0.132\text{mm}$  で得られた数値解析強度分布(Transverse 結合系)に良い一致をみた。解析結果を実験結果と比較すると、実験結果において中心部のストリップにおける電界強度が多少強くなっている。これは、LR-SPP 導波路アレイ素子の誘電体層によるスラブモードの混入や最近接する金ストリップへの同時 LR-SPP 励起などの実験上のエラーが主因と思われる。

## 第 5 章 結言

### 5.1 本研究で得られた成果

本研究では複素周波数領域有限差分法(FDCFD)と高速逆 Laplace 変換法(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設計に高精度かつ高速なソリューションを提示した。本論文の成果は以下のとおりである。

#### (A) 複素周波数領域有限差分法の開発(第 2 章)

Maxwell 方程式と波動方程式を用いる複素周波数領域有限差分法を開発し、電磁波散乱解析を行った。計算精度と誤差について検討し、以下の結果が得られた。

- (A-1) 吸収境界条件及び電子運動の分散性を複素周波数領域有限差分法に実装し、その有効性を確認した。
- (A-2) 複素周波数領域有限差分法を用いて金属円柱による電磁波散乱の周波数応答解析を行い、厳密解との相対誤差が 1%以下となることを明らかにした。
- (A-2) 複素周波数領域有限差分法と高速逆 Laplace 変換法の組み合わせた FDCFD-FILT を用い、金属円柱における電磁波散乱の時間応答解析を行い、従来の時間領域有限差分法との相対誤差が 0.1%以下であることを明らかにした。

#### (B) 複素周波数領域有限差分法と高速逆 Laplace 変換法の高速化(第 3 章)

複素周波数領域有限差分法のマルチレベル領域分割と高速逆 Laplace 変換法の最適化及び負荷分散方法をそれぞれ検討し、以下の成果が得られた。

- (B-1) マルチレベルの領域分割とシュアー補行列を適用することによって、三次元複素周波数領域有限差分法における線形方程式を直接法で解くことを実現した。
- (B-2) 複素平面で処理する特異点を選択することによって高速逆 Laplace 法の最適化を行った。金属球の電磁波散乱解析では従来の FILT に比べて約 5 倍の高速化を実現した。
- (B-3) 高速逆 Laplace 変換法の負荷分散方法を検討し、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。

#### (C) プラズモニックデバイスの設計(第 4 章)

複素周波数領域有限差分法と高速逆 Laplace 変換法を用いてプラズモニックデバイスの設計を行い、以下の成果が得られた。

- (C-1) 光直接磁気記録用のアパーチャー型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たことを確認した。

- (C-2) 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の設計を行い、グレーティング部の光結合率が最大 26%であり、50 $\mu\text{m}$ 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 $\mu\text{m}$ であることを確認した。
- (C-3) 金属ストリップ型プラズモニック導波路アレイにおける表面プラズモンの伝搬解析を行い、プラズモンがストリップ間に遷移する挙動を明らかにした。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。

## 5.2 今後に残された課題

- (A) 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[74]の支配方程式を Maxwell 方程式と連立的に解くことによって、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、本手法は安定条件を無視できるため、時間スケールが異なる物理現象の解析には適性がよいと予想される。

- (B) 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。

## 謝辞

本研究は、日本大学大学院理工学研究科電気工学専攻において、波動信号処理研究室の大貫進一郎教授のご指導のもと行ったものである。大貫進一郎教授は電磁波の数値解析について研究されており、著者に電磁界解析における高速化及び電磁デバイスの設計に関する研究の機会を与えて下さいました。近年のコンピュータシミュレーション技術と電子デバイスの小型化の発展に伴い、数値解析による光・電磁デバイスの開発に関する研究が現在活発に行われており、著者が多くの研究成果を発表することができたのも、大貫進一郎教授のご指導の賜であり、ここに謹んで感謝いたします。

大貫進一郎教授には本研究の遂行にあたり、電磁界理論と計算電磁気学の見知から別格のご指導を頂戴した。心より厚く御礼申し上げます。

本論文をまとめるにあたり、本学理工学研究科電気工学専攻古川慎一教授、本学理工学研究科電子工学専攻中川活二教授、本学理工学研究科量子理工学専攻井上修一郎教授には適切なお助言をいただいた。ここに深く感謝いたします。

おわりに、日頃からご指導、ご鞭撻を頂いている本学理工学部の諸先生方及び波動信号処理研究室の卒業生、メンバーにご礼を申し上げます。

## 参考文献

1. L. A. Coldren, S. W. Corzine, M. L. Mashanovitch, "Diode lasers and photonic integrated circuits," John Wiley and Sons, NY, USA, 2012.
2. S. J. McNab, N. Moll, and Y. A. Vlasov, "Ultra-low loss photonic integrated circuit with membrane-type photonic crystal waveguides," *Opt. Express*, vol.11, no.22, pp.2927-2939, 2003.
3. S. Bozhevolnyi, "Plasmonic nano guides and circuits," Jenny Stanford Publishing, NY, USA, 2009.
4. D. Wu, R. Ohnishi, R. Uemura, T. Yamaguchi, and S. Ohnuki, "Finite-difference complex-frequency-domain method for optical and plasmonic analyses," *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol.30, no.11, pp.1024–1027, 2018.
5. D. Wu, S. Kishimoto, S. Ohnuki, "Optimal Parallel Algorithm of Fast Inverse Laplace Transform for Electromagnetic Analyses," *IEEE Antennas Wirel. Propag. Lett.*, vol.19, no.12, pp. 2018–2022, 2020.
6. 吳迪, 浜島功, 井上修一郎, 大貫進一郎, "複素周波数領域有限差分法によるプラズモニック導波路の設計及び特性検証," *電子情報通信学会論文誌 C*, vol. J103–C, no. 2, pp. 69–77, 2020年2月.
7. D. Wu, R. Ohnishi, R. Uemura, T. Yamaguchi, and S. Ohnuki, "Finite-difference complex-frequency-domain method for optical and plasmonic analyses," *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol. 30, no. 11, pp. 1024–1042, 2018.
8. S. Ohnuki, R. Ohnishi, D. Wu, and T. Yamaguchi, "Time-division parallel FDTD algorithm," *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol.30, no.24, pp.2143-2146, 2018.
9. 電気学会編, 「計算電磁気学」, 培風館, 東京, 2003年.
10. J.M. Jin, "The finite element method in electromagnetics," John Wiley and Sons, NY, USA, 2015.
11. M. Koshiba, "Optical waveguide theory by the finite element method (Advances in optoelectronics)," Kluwer Academic Pub, Berlin, Germany.
12. W. C. Chew, J. M. Jin, E. Michielssen, J. Song, "Fast and efficient algorithms in computational," Artech House, MA, USA, 2001.
13. K. Yee, "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media," *IEEE Trans. Antennas Propag.*, vol.14, no.3, pp.302–307, May 1966.
14. A. Taflove, and S. C. Hagness, "Computational electrodynamics," 2nd ed., Norwood, MA, USA: Artech House, 1995.
15. 宇野亨, 「FDTD法による電磁界及びアンテナ解析」, コロナ社, 東京, 1998年.
16. 橋本修, 「実践FDTD時間領域差分法」, 森北出版, 東京, 2006年.
17. T. Namiki, "A new FDTD algorithm based on alternating-direction implicit method," *IEEE Trans. Microw. Theory Techn.*, vol.47, no.10, pp.2003–2007, 1999.

18. J. Shibayama, M. Muraki, J. Yamauchi, H. Nakano, "Efficient implicit FDTD algorithm based on locally one-dimensional scheme," *Electronics Letters*, vol.41, no.19, pp.1046–1047, 2005.
19. J. Shibayama, A. Nomura, R. Ando, J. Yamauchi, H. Nakano, "A frequency-dependent LOD-FDTD method and its application to the analyses of plasmonic waveguide devices," *IEEE journal of quantum electronics*, vol.46, no.1, pp.40-49, 2009.
20. W. E. I. Sha, W. C. H. Choy, and W. C. Chew, "A comprehensive study for the plasmonic thin-film solar cell with periodic structure," *Opt. Express*, vol.18, no.6, pp.5993–6007, 2010.
21. F. Xu, Y. Zhang, W. Hong, K. Wu, and T. J. Cui, "Finite-difference frequency-domain algorithm for modeling guided-wave properties of substrate integrated waveguide," *IEEE Trans. Microw. Theory Techn.*, vol.51, no.11, pp. 2221–2227, Nov. 2003.
22. Deinega, A. and I. Valuev, "Subpixel smoothing for conductive and dispersive media in the finite-difference time-domain method," *Opt. Lett.*, vol.32, no.23, pp.3429–3431, 2007.
23. T. Yamaguchi, M. Ebisawa, and S. Ohnuki, "Precise finite difference analysis of Lorentz force acting on metal nanoparticle irradiated with light," *Progress In Electromagnetics Research C*, vol.73, pp.81–86, 2017.
24. J.A. Kong. "Electromagnetic wave theory." EMW Publishing, MA, USA, 2008.
25. N. Karasawa, "Computer simulations of nonlinear propagation of an optical pulse using a finite-difference in the frequency-domain method," *IEEE J. Quantum Electron.*, vol.38, no.6, pp.626–629, 2002.
26. T. Hosono, "Numerical inversion of Laplace transform and some applications to wave optics," *Radio Sci.*, vol.16, no.6, pp.1015–1019, Nov.–Dec. 1981.
27. K. Nakagawa, Y. Ashizawa, S. Ohnuki, A. Itoh, A. Tsukamoto, "Confined Circularly Polarized Light Generated by Nano-Size Aperture for High Density All-Optical Magnetic Recording", *J. Appl. Phys.*, vol. 109, no.07B735, pp.07B735-1-07B735-3, 2011.
28. S. Kishimoto, T. Okada, S. Ohnuki, Y. Ashizawa, and K. Nakagawa, "Efficient analysis of electromagnetic fields for designing nanoscale antennas by using a boundary integral equation method with fast inverse Laplace transform," *Prog. Electromagn. Res.*, vol.146, pp.155–165, 2014.
29. B. Steinberger, A. Hohenau, H. Ditlbacher, A. L. Stepanov, A. Drezet, F. R. Aussenegg, A. Leitner, and J. R. Krenn, "Dielectric stripes on gold as surface plasmon waveguides," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 88, no. 9, pp. 094104, 2006.
30. A. Peruzzo, M. Lobino, et al., "Quantum walks of correlated photons," *Science*, vol.329, no.5998, pp. 1500-1503, 2010.
31. M. Karski, L. Förster, et al., "Quantum walk in position space with single optically trapped atoms," *Science*, vol.325, no.5937, pp. 174–177, 2009.

32. A. Crespi, R. Osellame, et al., "Anderson localization of entangled photons in an integrated quantum walk," *Nature Photonics*, vol.7, pp. 322–328, 2013.
33. W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, "Numerical recipes in C," 2nd ed., New York, NY, USA: Cambridge University Press, 1992.
34. E.L.Lindman, "Free-space boundary conditions for the time dependent wave equation," *J. Comp. Phys.*, vol.18, no.1, pp.66-78, 1975.
35. G. Mur, "Absorbing boundary condition for the finite difference approximation of the time-domain electromagnetic field equations," *IEEE Trans. Electromagn. Compat.* vol.23, no.4, pp.377–382, 1981.
36. G. Mur, "Absorbing boundary conditions for difference approximations to the multi-dimensional wave equation," *Mathematics of computation*, vol.47, no.176, pp. 437-459, 1985.
37. J.P. Berenger, "A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves," *J. Comp. Phys.*, vol.114, pp. 185–200, 1994.
38. J-P. Bérenger, "Numerical reflection from FDTD-PML's: A comparison of the split PML with the unsplit and CFS PML's", *IEEE Trans. Ant. and Propag.*, vol. 47, no. 10, pp. 258-265, 2002.
39. M. Kuzuoglu and R. Mittra, "Frequency dependence of the constitutive parameters of causal perfectly matched anisotropic absorbers," *IEEE Microwave and Guided Wave Letters*, vol. 6, pp. 447-449, 1996.
40. M. S. Tong, Y. C. Chen, M. Kuzuoglu and R Mittra, "A new anisotropic perfectly matched layer medium for mesh truncation in finite difference time domain analysis," *International Journal of Electronics*, vol. 86, pp. 1085-1091, Sept. 1999.
41. J. A. Roden, and S. D. Gedney, "Convolution PML (CPML): an efficient FDTD implementation of the CFS-PML for arbitrary media," *Microw. Opt. Technol. Lett.*, vol.27, no.5, pp.334–339, 2000.
42. C. J. Powell, "Analysis of optical and inelastic-electronscattering data II. Application to Al," *J. Opt. Soc. Am.* vol.60, pp.78–93, 1970.
43. M. I. Markovic' and A. D. Rakic', "Determination of optical properties of aluminum including electron reradiation in the Lorentz–Drude model," *Opt. Laser Technol.* 22, 394–398, 1990.
44. A. D. Rakić, A. B. Djurišić, J. M. Elazar, and M. L. Majewski, "Optical properties of metallic films for vertical-cavity optoelectronic devices," *Appl. Opt.*, vol.37, no.22, pp.5271–5283, 1998.
45. F. Javier García de Abajo, "Nonlocal Effects in the Plasmons of Strongly Interacting Nanoparticles, Dimers, and Waveguides," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol.112, no.46, pp.17983-17987, 2008.
46. C. Ciraci, R. T. Hill, J. J. Mock, Y. Urzhumoc, A. I. Fernandez-Dominguez, S. A. Maier, J. B. Pendry, A. Chilkoti, and D.R. Smith: "Probing the Ultimate Limits of Plasmonic Enhancement", *Science*, Vol. 337, No. 6098, pp. 1072-1074, August, 2012.

47. I. Schick, S. Lorentz, D. Gehrigm, S. Tenzer, W. Storck, K. Fischer, D. Strand, F. Laquai, and W. Tremel "Inorganic Janus particles for biomedical applications", *Belstein J. Nanotechnology*, Vol. 5, pp.2346-2362, Den, 2014.
48. T. Takeuchi, S. Ohnuki, and T. Sako, "A simple formula to predict the influence of the near-field in the optical control of confined electron systems," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol.50, no.4, pp. 045002-1-045002-13,2017.
49. T. Takeuchi, S. Ohnuki, T. Sako, "Maxwell-Shrödinger Hybrid Simulation for Optically Controlling Quantum States: A Scheme of Designing Control Pulses," *Phys. Rev. A*, vol.91, pp.033401, 2015.
50. T. Takeuchi, S. Ohnuki, T. Sako, "Hybrid Simulation of Maxwell-Shrödinger Equations for Multi-physics Problems Characterized by Anharmonic Electrostatic Potential," *Progress In Electromagnetics Research*, vol.148, pp.73-82, 2014.
51. C. Ciraci, J. B. Pendry, and D. R. Smith: "Hydrodynamic Model for Plasmonics: A Macroscopic Approach to a Microscopic Problem", *Chem. Phys. Chem.*, vol. 14, pp. 1109-1116, March, 2013.
52. L. H. Thomas, "The calculation of atomic fields," *Proc. Cambridge Phil. Soc.* vol.23, no.5, pp.542-548, 1927.
53. E. Fermi, "Un Metodo Statistico per la Determinazione di alcune Prioprietà dell'Atomo," *Rend. Accad. Naz. Lincei* vol.6, pp.602-607, 1927.
54. D. V. Widder, "The Laplace transform," *Princeton Mathematical Series*, NJ, USA: Princeton University Press, 1941.
55. R. D. Strum and J. R. Ward, "Laplace transform solution of differential equations," NJ, USA: Pearson Education, 1968.
56. F. Oberhettinger and L. Badii, "Tables of Laplace transform," Berlin, Germany: Springer.
57. M. Abramowitz and I. Stegun, "Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical table," NY, USA: Dover, 1964.
58. M. S. Mamiş, M. Köksal, "Solution of eigenproblems for state-space transient analysis of transmission lines," *Electric Power System Research*, vol.55, no.1, pp.7-14, 2000.
59. S. Ohnuki, Y. Kitaoka, and T. Takeuchi, "Time-Domain Solver for 3D electromagnetic problems using the method of moments and the fast inverse laplace transform," *IEICE Trans. Electron.*, vol.E99-C, no.7, pp.797-800, 2016.
60. S. Masuda, S. Kishimoto, and S. Ohnuki, "Reference solutions for time domain electromagnetic solvers," *IEEE Access*, vol. 8, no. 1, pp. 44318-44324, 2020.
61. S. Ohnuki and T. Hinata, "Transient scattering from parallel plate waveguide cavities," *IEICE Trans. Electron.*, vol. E88-C, no. 1, pp. 112-118, January 2005.
62. J. M. Song, W. C. Chew, "Fast multipole method solution using parametric geometry," *Microwave and Optical Technology Letters*, vol.7, no.16, pp.760-764, 1994.

63. C. Du, Y. Chiou, W. Wang, "Compressed Hierarchical Schur Algorithm for Frequency-domain Analysis of Photonic Structures," *Taiwanese J. Math*, vol.23, no.2, pp.473-501, 2019.
64. J. Mandel, "On block diagonal and Schur complement preconditioning," *Numerische Mathematik*, vol.58, no.1, pp.79-93, 1990.
65. R. Horn and F. Zhang, "The Schur complement and its applications," Berlin, Germany: Springer, 2005.
66. W. Yu, "Parallel finite-difference time-domain method," Norwood, MA, USA: Artech House, 2006.
67. 今野紀雄, 「量子ウォーク」, 森北出版, 東京, 2014年.
68. A. Ambainis, "Quantum walk algorithm for element distinctness," In Proc. of the 45th IEEE Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS), 22-31, 2004.
69. Renato Portugal, "Quantum Walks and Search Algorithms," Springer, 2018.
70. K. Manouchehri, and J. Wang, *Physical Implementation of Quantum Walks (Quantum Science and Technology)*, Springer, 2013.
71. P. Berini, "Long-range surface plasmon polaritons," *Advances in Optics and Photonics*, vol. 1, no. 3, pp. 484-588, 2009.
72. T. Sakaidani, R. Kobayashi, N. Namekata, G. Fujii, D. Fukuda, and S. Inoue, "Investigation of third-order dispersion of long-range surface-plasmon-polariton waveguides using a Hong-Ou-Mandel interferometer," *Optics Express*, vol. 25, no. 8, pp. 9490-9501, 2017.
73. G. Fujii, T. Segawa, S. Mori, N. Namekata, D. Fukuda, and S. Inoue, "Preservation of photon indistinguishability after transmission through surface-plasmon-polariton waveguide," *Opt. Lett.* vol. 37, no. 9, pp. 1535-1537, 2012.
74. Feynman, Richard P. (Richard Phillips), "The Feynman Lectures on Physics," Reading, Mass.: Addison-Wesley Pub. Co., 1963.

## 業績リスト

### 学術論文(査読あり)

1. D. Wu, S. Kishimoto, S. Ohnuki, "Optimal Parallel Algorithm of Fast Inverse Laplace Transform for Electromagnetic Analyses," IEEE Antennas Wirel. Propag. Lett., vol.19, no.12, pp. 2018–2022, 2020.
2. 呉迪, 浜島功, 井上修一郎, 大貫進一郎, "複素周波数領域有限差分法によるプラズモニック導波路の設計及び特性検証," 電子情報通信学会論文誌 C, vol. J103–C, no. 2, pp. 69–77, 2020年2月.
3. D. Wu, T. Yamaguchi, S. Inoue and S. Ohnuki, "Time-division Efficient Parallel Algorithm for Designing Metallic Slabs for Quantum Walk," Proceedings of Progress in Electromagnetics Research Symposium 2019 in Xiamen, pp. 1063-1069, 2019.
4. D. Wu, R. Ohnishi, R. Uemura, T. Yamaguchi, and S. Ohnuki, "Finite-difference complex-frequency-domain method for optical and plasmonic analyses," IEEE Photon. Technol. Lett., vol. 30, no. 11, pp. 1024–1042, 2018.
5. S. Ohnuki, R. Ohnishi, D. Wu, and T. Yamaguchi, "Time-division parallel FDTD algorithm," IEEE Photon. Technol. Lett., vol. 30, no. 24, pp. 2143–2146, 2018.

### 学術論文(査読なし)

1. 呉迪, 岸本誠也, 山口隆志, 大貫進一郎, "FILT法における並列分散処理の最適化," 信学技報, vol. 120, no. 221, EMT2020-26, pp. 1-4, 2020年11月.
2. 中沢佑, 呉迪, 岸本誠也, 柴山純, 山内潤治, 大貫進一郎, "2次元 LOD-FDTD法の時間分割並列計算への適用とプラズモニック導波路解析," 信学技報, vol. 120, no. 221, EMT-20-086, pp. 151-154, 2020年11月.
3. 安藤雄喜, 呉迪, 山口隆志, 岸本誠也, 大貫進一郎, "金属円柱列を用いたプラズモン導波路の設計 ～ 円柱の形状変化及び柱間距離に対するプラズモン応答特性 ～," 信学技報, vol. 119, no. 407, EST2019-95, pp. 81-84, 2020年1月.
4. 呉迪, 行方直人, 井上修一郎, 大貫進一郎, "金属スラブ型プラズモニック導波路アレイを用いた量子ウォークの基礎検証," The papers of Technical Meeting on Electromagnetic Theory, IEE Japan, EMT-19-114, 2019.
5. 田丸幸寛, 呉迪, 岸本誠也, 芦澤好人, 中川活二, 大貫進一郎, "混合薄膜の光学応答解析—クレッチマン配置における薄膜構造とプラズモン励起—," 信学技報, vol. 119, no. 243, EST2019-52, pp. 45-48, 2019年10月.



6. 谷口宣明, 大西峻平, 呉迪, 山口隆志, 大貫進一郎, “CIP 法における異なる格子間の電磁界接続に関する一検討,” 信学技報, vol. 118, no. 400, EST2018-119, pp. 225-228, 2019 年 1 月.
7. 遠藤源博, 呉迪, 増田宗一郎, 山口隆志, 大貫進一郎, “微小金属柱の直交配列に対する伝搬モード解析,” 信学技報, vol. 118, no. 400, EST2018-120, pp. 229-232, 2019 年 1 月.
8. 呉迪, 山口隆志, 大貫進一郎, “複素周波数領域有限差分法による表面プラズモンの応答解析 ～ 光アンテナ・導波路設計への応用 ～,” 信学技報, vol. 118, no. 307, EMT2018-58, pp. 119-122, 2018 年 11 月.
9. 大西峻平, 呉迪, 山口隆志, 大貫進一郎, “FILT 法による時間領域並列アルゴリズムの開発,” 信学技報, vol. 118, no. 307, EMT2018-54, pp. 81-84, 2018 年 11 月.
10. 呉迪, 山口隆志, 大貫進一郎, “複素周波数領域有限差分法による表面プラズモンの時間応答解析 ～ 三次元問題への拡張 ～,” 信学技報, vol. 118, no. 144, EST2018-12, pp. 45-48, 2018 年 7 月.
11. 呉迪, 山口隆志, 大貫進一郎, “光デバイスの設計に向けた電磁界時間-周波数応答解析 ～ 有限差分法と高速逆 Laplace 変換法の併用 ～,” 信学技報, vol. 117, no. 289, EMT2017-67, pp. 183-186, 2017 年 11 月.
12. 大貫進一郎, 遠藤源博, 高橋涼, 呉迪, 山口隆志, “微小金属柱列における光学応答解析 ～ ピーク波長と断面形状 ～,” 信学技報, vol. 117, no. 74, EMT2017-2, pp. 11-14, 2017 年 6 月.
13. 呉迪, 山口隆志, 大貫進一郎, “複素周波数領域有限差分法による電磁界散乱解析 ～ 数値逆 Laplace 変換の併用及び時間応答 ～,” 信学技報, vol. 117, no. 37, EST2017-2, pp. 5-8, 2017 年 5 月.
14. 呉迪, 高橋涼, 長澤和也, 竹内嵩, 山口隆志, 大貫進一郎, “金属ナノ粒子における表面プラズモンの伝搬解析 ～ 粒子の配置と形状による位相制御 ～,” 信学技報, vol. 116, no. 309, EMT2016-45, pp. 33-36, 2016 年 11 月.

## 著書

1. 大貫進一郎, 山口隆志, 呉迪, 「磁性材料・部品の最新開発事例と応用技術」, 第 4 章, 第 2 節, 技術情報協会, 2018 年 3 月.

## 特許

1. 大貫進一郎, 山口隆志, 呉迪, 大西峻平, 演算装置、演算管理装置及びプログラム, 特開 2019-128918, 2019 年 8 月.

## 国際会議

1. D. Wu, T. Yamaguchi, S. Inoue, and S. Ohnuki, “Time-division Efficient Parallel Algorithm for Designing Metallic Slabs for Quantum Walk,” PIERS 2019 in Xiamen, Xiamen, 2019.
2. D. Wu, K. Hamashima, N. Namekata, S. Inoue, and S. Ohnuki, “Design of Plasmonic Devices by a Time-frequency Domain Analysis Using the FDCFD-FILT Method,” PIERS 2019 in Xiamen, Xiamen, 2019.
3. K. Hamashima, D. Wu, S. Kishimoto, S. Inoue, and S. Ohnuki, “Investigation of Plasmon Modes for a Thin-metal Waveguide Using Grating Structure,” PIERS 2019 in Xiamen, Xiamen, 2019.
4. S. Ohnuki, D. Wu, S. Masuda, S. Kishimoto, “(invited) Frequency and Time Analysis of Electromagnetic Waves Based on Complex-Frequency-Domain Techniques,” ISAP 2019, Xi’an, 2019.
5. Y. Ando, D. Wu, T. Yamaguchi, and S. Ohnuki, “Propagation analysis of electromagnetic field through nano-size metal array,” 2019 URSI-JRSM, Tokyo, 2019.
6. K. Hamashima, D. Wu, S. Kishimoto, S. Inoue, and S. Ohnuki, “Fundamental Study of Surface Plasmon Modes Using Grating Structure,” 2019 URSI-JRSM, Tokyo, 2019.
7. S. Ohnuki, R. Ohnishi, D. Wu, T. Yamaguchi, “(invited) Novel Parallel Finite-Difference Method for Designing Plasmonic Devices,” EMTS 2019, San Diego, 2019.
8. D. Wu, Y. Ando, S. Masuda, S. Nishino, R. Ohnishi, T. Yasuda, S. Ohnuki, “(invited) Complex-Frequency-Domain Analysis of Electromagnetic Waves,” EMTS 2019, San Diego, 2019.
9. R. Ohnishi, D. Wu, T. Yamaguchi, S. Ohnuki, “Numerical accuracy of finite difference methods,” ISAP2018, October 23-26, Korea, 2018.
10. D. Wu, R. Ohnishi, T. Yamaguchi, and S. Ohnuki, “Time-Frequency Analysis of Electromagnetic Wave Using a Perfectly Parallel Algorithm”, PIERS 2018 in Toyama, Toyama, 2018.
11. D. Wu, T. Yamaguchi, and S. Ohnuki, “EM Analysis of Electromagnetic Devices Using Finite-Difference Complex-Frequency-Domain Method”, PIERS 2018 in Toyama, Toyama, 2018.
12. D. Wu, T. Yamaguchi and S. Ohnuki, “Efficient Near-Field Analysis Based on Finite-Difference Scheme and Fast Inverse Laplace Transform,” 2nd URSI AT-RASC, Gran Canarias, 2018.
13. D. Wu, T. Yamaguchi and S. Ohnuki, “A Novel Algorithm for Electromagnetic Problems in Time and Frequency Domains,” PIERS 2017 in Singapore, 0A9-5, 2017.
14. S. Ohnuki, D. Wu, S. Watanabe, R. Takahashi, T. Yamaguchi, “Precise Analysis of Near-Field Light Using Fast Inverse Laplace Transform,” URSI-GASS 2017, Montreal, Canada, 2017.

## 国内会議

1. 呉迪, 岸本誠也, 大貫進一郎, “高速逆ラプラス変換における並列計算コストの最適化,” 2021年電子情報通信学会総合大会, C-15-XX, 2021.(発表予定)
2. 呉迪, 井上修一郎, 大貫進一郎, “量子ウォークの実現に向けたプラズモニック導波路アレイの基礎検討,” 2019年電子情報通信学会エレクトロニクスソサイエティ大会, C-1-3, 大阪大学, 2019.
3. 安藤雄喜, 呉迪, 山口隆志, 大貫進一郎, “FDFD法を用いた金属円柱列の電磁界特性解析~非局所効果を考慮した解析モデルの場合~, ” 2019年電子情報通信学会エレクトロニクスソサイエティ大会, C-1-6, 大阪大学, 2019.
4. 浜島功, 呉迪, 岸本誠也, 井上修一郎, 大貫進一郎, “グレーティング構造を用いた長距離伝搬プラズモン解析の基礎検証,” 2019年電子情報通信学会エレクトロニクスソサイエティ大会, C-15-23, 大阪大学, 2019.
5. 安藤雄喜, 呉迪, 遠藤源博, 大貫進一郎, “FDFD法を用いた金属細線導波路の伝搬解析,” 電子情報通信学会 OPE 研究会, 2019.
6. 大西峻平, 呉迪, 山口隆志, 大貫進一郎, “時間領域電磁界解析における完全並列計算法,” 2019年電子情報通信学会総合大会, C-1-14, 早稲田大学, 2019.
7. 大貫進一郎, 呉迪, 大西峻平, 増田宗一郎, 山口隆志, “(招待講演)高速逆 Laplace 変換法による光デバイス解析,” 2019年電子情報通信学会総合大会, C-3-6, 早稲田大学, 2019.
8. 谷口宣明, 大西峻平, 呉迪, 山口隆志, 大貫進一郎, “異なる格子間の界接続における影響—CIP法とFDFD法の場合—,” 2019年電子情報通信学会総合大会, C-15-8, 早稲田大学, 2019.
9. 呉迪, 山口隆志, 大貫進一郎, 井上修一郎, “FDFD法による三次元プラズモニック導波路の解析,” 2019年電子情報通信学会総合大会, C-15-9, 早稲田大学, 2019.
10. 大西峻平, 呉迪, 山口隆志, 大貫進一郎, “電磁界解析における有限領域差分法の計算精度,” 2018年電子情報通信学会エレクトロニクスソサイエティ大会, 金沢大学, 2018.
11. 呉迪, 遠藤源博, 増田宗一郎, 大貫進一郎, “複素周波数領域有限差分法における光学応答解析—非局所効果を考慮した光学応答モデル—,” 2018年電子情報通信学会エレクトロニクスソサイエティ大会, C-1-15, 金沢大学, 2018.
12. 呉迪, 山口隆志, 大貫進一郎, “有限差分法による金属球の電磁波散乱応答解析—三次元複素周波数領域有限差分法—,” 2018年電子情報通信学会エレクトロニクスソサイエティ大会, C-15-7, 金沢大学, 2018.
13. 呉迪, 大西峻平, 山口隆志, 大貫進一郎, “複素周波数領域有限差分法による金属球の電磁散乱解析,” 2018年電子情報通信学会総合大会, C-15-18, 東京電機大学, 2018.

14. 吳迪, 山口隆志, 大貫進一郎, “時間周波数領域における金属円柱の電磁波散乱解析 ～ FDFD 法と高速数値逆 Laplace 変換の併用～,” 2017 年電子情報通信学会エレクトロニクスソサイエティ大会, C-15-11, 東京都市大学, 2017.
15. 吳迪, 渡部慎太郎, 山口隆志, 大貫進一郎, “複素周波数領域有限差分法による電磁波散乱解析,” 2017 年電子情報通信学会総合大会, C-15-1, 名城大学, 2017.
16. 吳迪, 山口隆志, 大貫進一郎, “金属円柱列における表面プラズモンの伝搬解析—断面形状が変化した場合—” 2016 年電子情報通信学会エレクトロニクスソサイエティ大会, C-1-5, 北海道大学, 2016.

## 学内発表

1. 浜島功, 吳迪, 岸本誠也, 井上修一郎, 大貫進一郎, “グレーティング構造を用いたプラズモニック導波路の設計～ 表面プラズモンのモード特性検証 ～,” 日本大学理工学部第 63 回学術講演会, L-29, 2019.
2. 中沢佑, 吳迪, 岸本誠也, 大貫進一郎, “陰解法を用いた時間分割並列計算による電磁界解析,” 日本大学理工学部第 63 回学術講演会, L-62, 2019.
3. 安藤雄喜, 吳迪, 岸本誠也, 大貫進一郎, “FDFD 法を用いた微小金属円柱列におけるプラズモンモード特性解析,” 日本大学理工学部第 63 回学術講演会, L-28, 2019.
4. 田丸幸寛, 吳迪, 岸本誠也, 芦澤好人, 中川活二, 大貫進一郎, “クレッチマン配置における光学応答解析-複数金属媒質に対するモデリングの検討-,” 日本大学理工学部第 63 回学術講演会, L-26, 2019.
5. 劉立成, 吳迪, 大貫進一郎, “機械学習を用いた電磁散乱体の形状認識,” 日本大学理工学部第 62 回学術講演会, L-20, 2018.
6. 安藤雄喜, 大西峻平, 浜島功, 田丸幸寛, 増田宗一郎, 吳迪, 大貫進一郎, “誘電体円柱フォトニック結晶導波路における電磁波伝搬解析の基礎検証,” 日本大学理工学部第 62 回学術講演会, L-45, 2018.
7. 吳迪, 山口隆志, 大貫進一郎, “金属円柱の電磁界時間 - 周波数応答解析—FDFD 法及び高速逆 Laplace 変換の併用—,” 日本大学理工学部第 61 回学術講演会, L-8, 2017.
8. 吳迪, 山口隆志, 大貫進一郎, “FDFD 法による金属円柱列における表面プラズモンの伝搬解析—断面形状の変化について—,” 日本大学理工学部第 60 回学術講演会, L-16, 2016.
9. 吳迪, 立澤圭輔, 大貫進一郎, “光直接磁気記録用ナノアンテナの厚み変化に対する性能評価,” 日本大学理工学部第 59 回学術講演会, L-51, 2015.

## 受賞リスト

1. Di Wu, Best Student Paper Award (1<sup>st</sup> Prize), PIERS 2019 in Xiamen, 17-19 December 2019.
2. 呉迪, 学術奨励賞, 電子情報通信学会, 2019年3月24日.
3. 呉迪, 学生優秀発表賞, 平成29年度電磁界理論研究会, 電子情報通信学会, 2018年3月21日.
4. 呉迪, 優秀発表賞, 第61回日本大学理工学部学術講演会, 日本大学, 2017年2月8日.
5. 増田総一郎, 大西峻平, 呉迪, 優秀賞, 第1回若手・学生エレクトロニクスソフトウェアコンテスト, 電子情報通信学会, 2017年9月11日.
6. 呉迪, 優秀発表賞, 第60回日本大学理工学部学術講演会, 日本大学, 2016年2月16日.
7. 呉迪, 優秀発表賞, 東京支部主催第6回学生研究発表会, 電気学会, 2015年8月31日.