

S2-5

ナノ電磁界シミュレーションによる光と物質の相互作用の解析

Analysis of Light and Material Interactions Using Nano-Electromagnetic Simulation

大貫進一郎¹Shinichiro Ohnuki¹

Abstract: Recently, novel fast and accurate solvers have been developed for time domain electromagnetic and multi-physics problems in nano-scale. We will review recent progress of our nano-electromagnetic simulation and its applications to plasmonic devices. Our designed plasmonic antennas will be introduced to generate localized circularly polarized light for realizing ultra-fast and ultra-high density magnetic recording.

1. はじめに

近年のナノテクノロジーの発展に伴い、ナノスケールの対象物近傍に局在する近接場光が注目されている。近接場光を効率良く利用するためには、光と物質の相互作用を電磁界シミュレーションにより解析することが重要である。しかし、フェムト秒レーザなどに代表される急峻な時間変化をする光パルスや、ナノ領域の空間に局在するプラズモンの解析などでは、時空間の刻みを細分化したシミュレーションが必要となり、計算量および計算機メモリが膨大となる問題点があった。

著者の研究グループでは、複素周波数領域の積分方程式法に数値逆ラプラス変換法を併用した、ナノスケールの電磁界時間応答解析法を開発した^[1-6]。開発手法は任意の時間刻みに対する解析が可能であり、高速かつ信頼性の高い電磁界シミュレーションが実現できる。また、ナノスケールの電磁界解析をさらに発展させた、複合物理計算法の開発も行っている^[7]。本計算手法では、光と物質の相互作用をより正確な物理モデルで扱うため、光を Maxwell 方程式、物質を Schrödinger 方程式で表現し、時空間同時解析を行う。これより、量子力学的効果を考慮したデバイス設計が可能となる。

本文では、著者らが近年開発を行っている高速かつ高精度なナノスケールの電磁界解析法、量子力学的効果を考慮した複合物理計算法、およびこれらの解析例について述べる。超高速・超高密度磁気記録を実現するために設計したデバイス^[8-13]の解析例では、円偏光をナノ領域に局在させ、電界強度を入射光に比べて増強できるプラズモニックアンテナを紹介する。本成果は、記録速度が従来技術の 10 万倍、記録密度が数倍程度となる次世代磁気記録実現へのブレークスルー技術とし

て注目されている^[8,9]。

2. ナノスケール電磁界解析法の開発

境界型積分方程式法 (Boundary Integral Equation Method: BIEM)^[14]と高速逆ラプラス変換法 (Fast Inverse Laplace transform: FILT)^[15]を併用し、ナノスケールの任意形状物体に対する電磁界時間応答解析法を開発した^[1-6]。また、BIEM に高速多重極法 (Fast Multipole Method: FMM) を適応することで、計算量および計算機メモリ使用量の低減も併せて実現した。

本手法での解析対象物は、任意形状の微小金属とする。入射波長に比べ対象物が十分小さい場合、電磁界に対する静的近似と境界条件より、以下の積分方程式が得られる。

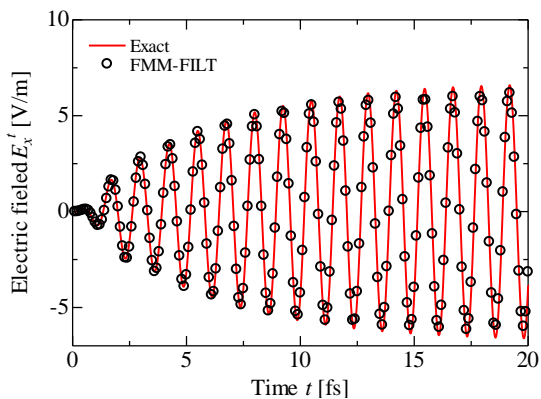
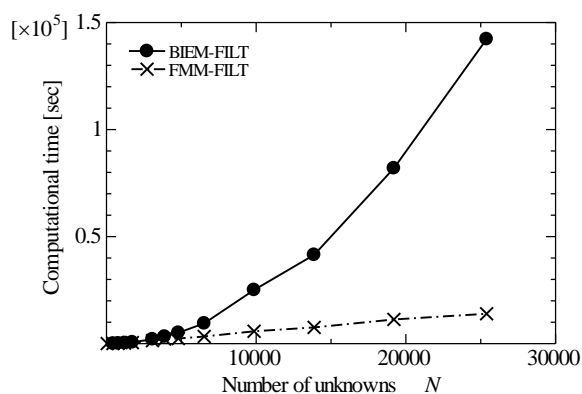
$$\sigma(\mathbf{r}, s) - \frac{\lambda}{2\pi_s} \int \sigma(\mathbf{r}', s) \frac{\mathbf{n} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} dS' = 2\varepsilon_0 \lambda \mathbf{n} \cdot \mathbf{E}^i f(s) \quad (1)$$

ここで、

$$\lambda = \frac{\varepsilon(s) - \varepsilon_0}{\varepsilon(s) + \varepsilon_0} \quad (2)$$

$\sigma(\mathbf{r}, s)$ は未知表面電荷密度、 $f(s)$ は入射波のスペクトル、 \mathbf{n} は境界面における外向きの単位法線ベクトルを示す。BIEM では、式(1)の積分方程式を離散化して得られる連立一次方程式を解くことで表面電荷密度を求める。この際、連立一次方程式の求解に必要な計算量は未知数 N に対し $O(N^2)$ で増加する。

BIEM に FMM を適用する場合、求める要素をボックス分割する。ボックス内に含まれる各要素から、ボックス中心への寄与を展開し、それぞれの要素に対し相互作用を計算する。この際、以下に示すグリーン関数を用いることで、従来法に比べ高速な演算が可能とな


Figure 1. Time domain response of a metallic nanosphere

Figure 2. Computational time for varying the number of unknowns

る。

$$\frac{\mathbf{n} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^3} = -\sum_{n=0}^L \sum_{m=-n}^n (-1)^n R_{n,m}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_m) \quad (3)$$

$$\times \sum_{n'=0}^L \sum_{m'=-n'}^{n'} \frac{S_{n+n',m+m'}(\mathbf{r}_m' - \mathbf{r}_m)}{\partial n_j} \frac{\partial R_{n,m}(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_j)}{\partial n_j}$$

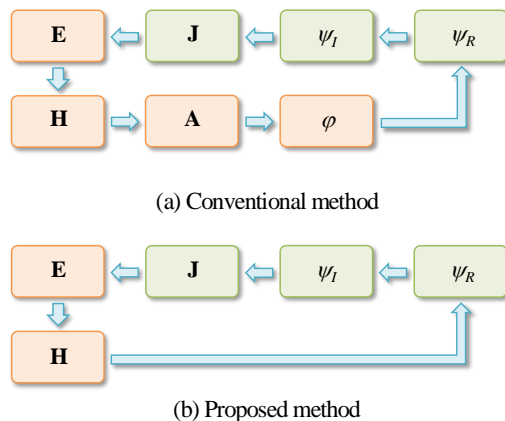
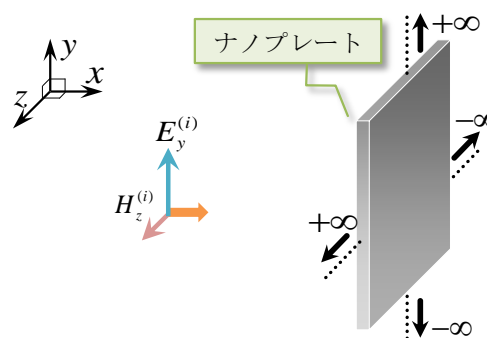
但し、 L はFMMの打ち切り項数、

$$R_{n,m}(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{(n+m)!} P_n^m(\cos \theta) e^{im\phi} r^n \quad (4)$$

$$S_{n,m}(\mathbf{r}_i) = (n-m)! P_n^m(\cos \theta) e^{im\phi} \frac{1}{r^{n+1}} \quad (5)$$

FMMの計算量は $O(N^{1.5})$ であり、ボックス分割を多重レベルに拡張することで計算量を $O(N)$ に低減できる。時間応答解析を行うには、複素周波数領域で求めた電磁界にFILT法^[15]を用いて時間領域へ変換する。

図1に、半径2.5 nmの微小金属球に対する時間応答波形を示す。入射波は電界が x 方向成分のみを持つ z 軸負方向に進行する正弦波とし、球の媒質を銀、その分性をLorentz-Drudeモデルとして与える^[2]。観測点 $x =$


Figure 3. Computational algorithm of the coupled analysis

Figure 4. Geometry and coordinate system of the nano plate

3.0 nm, $y = z = 0$ における電界の時間応答波形は、実線の厳密解と図上で完全に一致する。

図2に未知数 N に対する計算時間を示す。実線でBIEM-FILT法の計算時間、破線で高速化したFMM-FILT法の計算時間を示す。未知数 N が2,000を越えるあたりでFMMによる高速化が確認でき、 N が25,000を越えると、10倍以上の高速化が確認できる。

3. 複合物理計算法の開発

微細加工技術の発展に伴い、量子力学的効果を考慮したデバイス設計の重要性が増している^[16]。著者のグループでは、光をMaxwell方程式、物質をSchrödinger方程式で表現し、これらの時空間同時解析法を開発した^[7]。

図3にMaxwell-Schrödinger複合物理計算法のアルゴリズムを示す。ここで、図中の ψ_R と ψ_I は、物質中の電子の波動関数実部と虚部を示す。図3(a)は従来法のアルゴリズムであり、ベクトルポテンシャル \mathbf{A} とスカラーポテンシャル ϕ の計算が必要となる。著者らが提案

する図 3 (b)のアルゴリズムでは, \mathbf{A} と φ の更新が不要であり, 従来法に比べて計算時間を短縮できる.

次に, 図 4 の y - z 平面に一樣なナノプレートとの光相互作用の解析例を紹介する. ナノプレート内の全ての電子は y 方向のみに自由度を持ち, 図 5 の一重井戸型構造 V_S あるいは三重井戸型構造 V_T のポテンシャルに束縛されていると仮定する. 入射波は E_y と H_z 成分により構成する.

図 6 にナノプレート内の分極電流密度の時間応答を示す. 実線が Maxwell-Schrödinger 複合物理計算法の結果を, 点線が電子の運動を古典的に表現した Maxwell-Newton 複合物理計算法^[17]の結果を示す. ポテンシャルを一重井戸型構造 V_S とした場合の図 6 (a)では, 2 つの複合物理計算は等価な結果となる. ポテンシャルを三重井戸型構造 V_T とした図 6 (b)では, 両者に大きな違いが現れ, 多重井戸型構造に起因するトンネル効果の影響が確認できる.

本研究ではトンネル効果の影響が小さい場合についても検討を行い, この条件下では 2 つの複合物理計算法の結果が等しくなることも併せて確認している.

4. 超高速・超高密度磁気記録用デバイスの設計

円偏光を磁気記録媒体に照射することで磁化反転を行う光直接記録方式が注目されている. 本方式の記録速度は, 従来技術の最大 10 万倍を実現できることから, 次世代の超高速磁気記録方式として有力である^[9, 18]. ここでは本記録方式による高密度化を検証するために, 局所的円偏光を生成するプラズモニックアンテナと粒子状記録媒体のナノ電磁界シミュレーション例を紹介する.

図 7 に解析モデルを示す. 入射波は, 波長 780 nm, 振幅 1.0V/m, z 軸負方向に進行する平面波とし, x 軸および y 軸に沿って媒質が金のプラズモニックアンテナを配置する. このアンテナは直線偏光の入射に対し, 電界の x 成分および y 成分間に 90° の位相差を持つプラズモンを励起する. これより, アンテナ中央に位置する粒子状記録媒体内部においてのみ, 局所的な円偏光が生成される. ここで, 円偏光は次式で定義する電界強度 I , 円偏光度 C' ^[8]を用いて評価する.

$$I = \langle E_x^2(t) \rangle + \langle E_y^2(t) \rangle + \langle E_z^2(t) \rangle \quad (5)$$

$$C' = \frac{2\langle E_x(t)E_y(t)\sin(\delta_x - \delta_y) \rangle}{\langle E_x^2(t) \rangle + \langle E_y^2(t) \rangle + \langle E_z^2(t) \rangle} \quad (6)$$

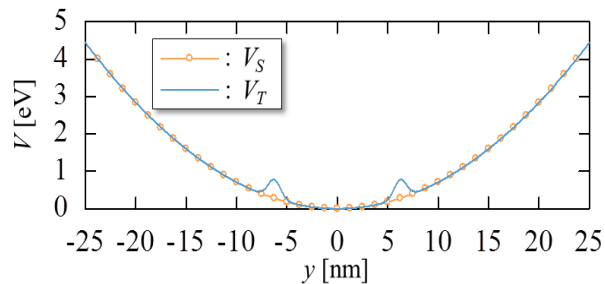
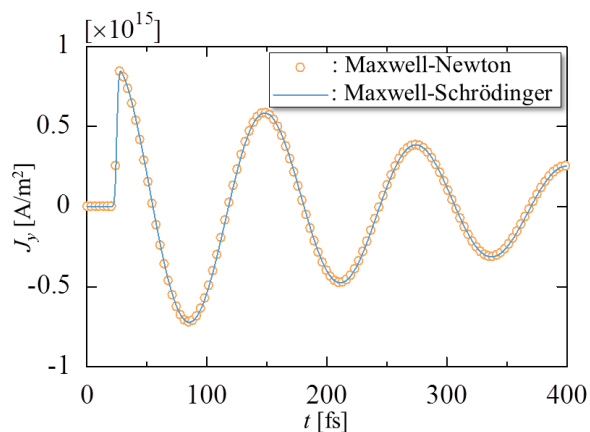
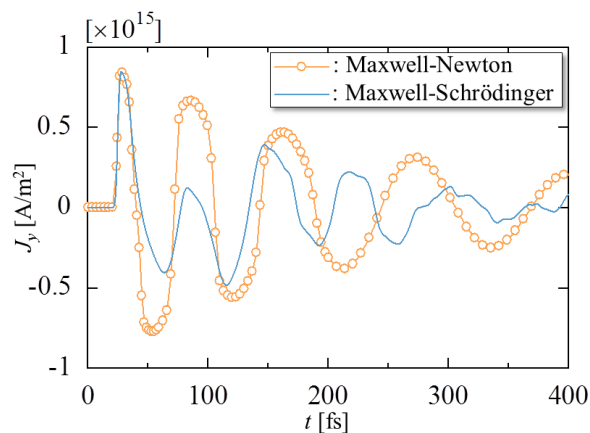


Figure 5. Spatial profile of the electrostatic potentials



(a) Polarization current densities for single-well structure V_S



(b) Polarization current densities for triple-well structure V_T

Figure 6. Comparison between Maxwell-Schrödinger and Maxwell-Newton schemes

式中の E_x, E_y, E_z は電界の各成分, $(\delta_x - \delta_y)$ は E_x と E_y の位相差を表す. 粒子状記録媒体は 1 平方インチ当たり 2 Tbit の記録密度を実現するように配置した.

図 8 に記録媒体の厚み方向の中央断面における電界強度 I と円偏光度 C' の分布を示す. 図 8 (a) に示した電界強度 I は, アンテナ中央に位置する粒子媒体は隣接する他の粒子媒体に比べ, 2 倍程度高くなる. 図 8 (b) は観測面における円偏光度 C' の分布を示す. アンテナ中央に位置する記録媒体でのみ円偏光度が +1 となり,

右回り円偏光が生成されている。著者らが提案するプラズモニックアンテナと粒子状記録媒体を用いた磁気記録方式では、アンテナ下部の記録媒体 1 つにのみ 1 bit の記録を行うことが可能となり、記録速度が従来技術の 10 万倍、記録密度が数倍程度となる次世代の磁気記録が表現できる。

5. 謝辞

日頃お世話になっております電気工学科の先生方および共同研究者の先生方に感謝申し上げます。また、数値実験に協力してくれました波動信号処理研究室の卒業生並びに在校生に感謝致します。

本研究の一部は、日本大学学術研究戦略プロジェクト、私立大学戦略的研究基盤形成支援事業、科研費基盤研究(C)No.22560349、およびカシオ科学振興財団研究助成の援助を受けて行われた。

6. 参考文献

- [1] S. Ohnuki and Y. Kitaoka : IEICE Trans. Electron. Vol.E94-C, No.1, pp.68-71, 2011.
- [2] S. Kishimoto, S. Ohnuki, Y. Ashizawa, K. Nakagawa, and W. C. Chew : J. Electromagn. Waves and Appl., Vol. 26, No. 8/9, pp. 997-1006, 2012.
- [3] 大貫進一郎, 千葉英利: 電子情報通信学会誌, Vol.96, No.6, pp.391-395, 2013.
- [4] S. Kishimoto and S. Ohnuki : IEICE Trans. Electron. Vol.E95-C, No.1, pp.71-78, 2012.
- [5] M. Hirano and S. Ohnuki : IEICE Electronics Express, Vol.8, No.16, pp.1330-1336, 2011.
- [6] 平野正樹, 岸本誠也, 大貫進一郎: 電子情報通信学会論文誌 C, Vol.J96-C, No.6, pp. 149-150, 2013.
- [7] S. Ohnuki, T. Takeuchi, T. Sako, Y. Ashizawa, K. Nakagawa, and M. Tanaka : Int. J. Numerical Modeling; Electronic Networks, Devices and Fields, Vol. 26, pp. 533-544, 2013.
- [8] K. Nakagawa, Y. Ashizawa, S. Ohnuki, A. Itoh, and A. Tsukamoto : J. Appl. Phys., Vol.109, pp. 07B735-1-07B735-3, 2011.
- [9] 大貫進一郎, 中川活二, 芦澤好人, 塚本新, 伊藤彰義: 電気学会論文誌, 2014 (掲載予定).
- [10] T. Ota, Y. Ashizawa, K. Nakagawa, S. Ohnuki, H. Iwamatsu, A. Tsukamoto, and A. Itoh : J. Magn. Soc. Jpn., Vol.36, pp. 66-69, 2012.
- [11] K. Nakagawa, A. Tajiri, K. Tamura, S. Toriumi, Y. Ashizawa, A. Tsukamoto, A. Itoh, Y. Sasaki, S. Saito, M. Takahashi, and S. Ohnuki : J. Magn. Soc. Jpn., Vol.37, pp.119-122, 2013.

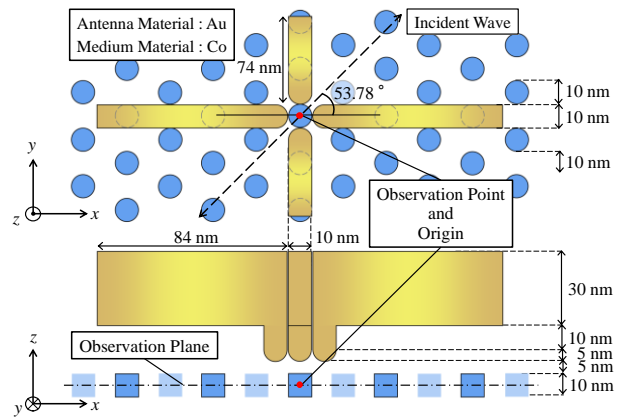


Figure 7. Plasmonic antenna and particulate media for all-optical magnetic recording

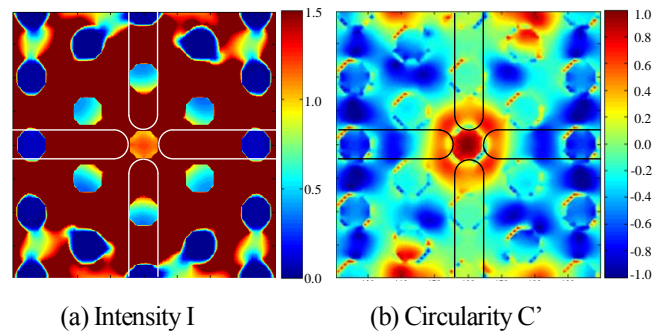


Figure 8. Field distribution of Intensity and Circularity at the middle of the particulate media on the x - y plane

- [12] K. Nakagawa, Y. Osa, A. Tajiri, Y. Ashizawa, S. Ohnuki, Y. Sasaki, S. Saito, M. Takahashi, and A. Itoh : J. Magn. Soc. Jpn., Vol.36, pp.58-61, 2012.
- [13] K. Tamura, T. Ota, Y. Ashizawa, A. Tsukamoto, A. Itoh, S. Ohnuki, and K. Nakagawa : J. Magn. Soc. Jpn., Vol.37, pp.115-118, 2013.
- [14] I. D. Mayergoyz, D. R. Fredkin, and Z. Zhang : Physical Review B, Vol. 72, 155412-1-155412-15, 2005.
- [15] T. Hosono : Radio Science, Vol.16, pp.1015-1019, 1981.
- [16] L. Pierantoni, D. Mencarelli, and T. Rozzi : IEEE Trans. MTT, Vol.56, No.3, pp.654-662, 2008.
- [17] T. Yamaguchi and T. Hinata : Opt. Express, Vol.15, pp.11481-11491, 2007.
- [18] C. D. Stanciu, F. Hansteen, A. V. Kimel, A. Kirilyuk, A. Tsukamoto, A. Itoh, and Th. Rasing : Phys. Rev. Lett., Vol. 99, pp. 047601-1-047601-4, 2007.